

ISSN 2304-7453

FİZİKA-TEXNIKA VƏ RİYAZİYYAT EMLƏRİ SERİYASI
SERIES OF PHYSICAL-TECHNICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES

AZƏRBAYCAN MİLLİ EMLƏR AKADEMİYASININ
XƏBƏRLƏRİ

FİZİKA VƏ ASTRONOMİYA

**TRANSACTIONS
OF
AZERBAIJAN NATIONAL ACADEMY
OF SCIENCES**

PHYSICS AND ASTRONOMY

CİLD

XXXV

№ 5

VOLUME

<<ELM>> NƏŞRİYYATI

<<ELM>> PUBLISHERS

BAKİ – 2015 – BAKU

REDAKSİYA HEYƏTİ

A.C.Hacıyev - baş redaktor, M.İ.Əliyev - baş redaktorun müavini, R.M.Əliquliyev - baş redaktorun müavini, Ə.M.Abbasov, Ç.O.Qaçar, C.E.Allahverdiyev, T.A.Əliyev, F.Ə.Əliyev, İ.Ə.İbrahimov, A.Ş.Mehdiyev, A.M.Paşayev, F.M.Həşimzadə, E.Y.Salayev, C.Ş.Abdinov, T.C.Cəfərov, F.H.Hacıyev, M.F.Mehdiyev, B.H.Tağıyev, A.M.Həsimov, Ə.Ş.Quliyev, F.M.İmranov-məsul katib.

BURAXILIŞIN REDAKSİYA HEYƏTİ

M.İ.Əliyev - baş redaktor, Ə.Ş.Quliyev - baş redaktorun müavini, N.T.Məmmədov - baş redaktorun müavini, C.Ş.Abdinov, A.A.Qəribov, T.C.Cəfərov, Ö.B.Abdinov, N.S.Cəlilov, R.R.Hüseynov, İ.H.Cəfərov, H.X.Əjdərov, E.K.Hüseynov, Ş.M.Nağıyev, S.İ.Mehdiyeva, H.B.İbrahimov, T.R..Mehdiyev, A.A.Xəlilova-məsul katib, İ..A.Məmmədyarova - texniki redaktor.

MÜƏLLİFLƏRİN NƏZƏRİNƏ

Jurnal fizika və astronomiyanın müxtəlif sahələrinə həsr olunmuş orijinal və qısa məlumatları qəbul edir. Məqalələr bütün dünya tədqiqatçılarından qəbul olunur.

Ölyazmalar azərbaycan, rus və ingilis dillərində təqdim oluna bilər. Hər bir məqalənin əvvəlində məqalə yazılan dildə qısa xülasə çap edilir. Xülasənin həcmi 70 sözdən artıq olmamalıdır. Nəşr olunmaq üçün göndərilən məqalə Microsoft WordTM (şrift – Times New Roman) formatında yazılaraq 210x297mm ölçülü ağ kağızin bir üzündə, 1 intervalla, lazımı sahə saxlanmaqla (yuxarıdan – 30mm, soldan – 22,5mm, aşağıdan – 30mm, sağdan – 22,5mm), məqalənin adı qalın -12, müəlliflər – qalın -12, müəssisə, poçt ünvanları, telefon, e-mail, faks – normal 12, iki interval buraxmaqla mətn - normal, düzünə 12, çap edilir. Məqalələr 2 nüsxədə və CD kompakt diskdə işin yerinə yetirildiyi təşkilatın məktubu ilə redaksiyaya təqdim olunur. Çapa qəbul olunmayan məqalələr geri qaytarılmır.

1. TİTUL VƏRƏQƏTİ

Məqalənin titul vərəqində UOT göstərilməli, 1 sətir buraxmaqla: məqalənin adı (böyük hərflərlə); müəlliflərin adı, atasının adı, soyadı, (böyük hərflərlə); tədqiqatçıların iş yeri, müəssisənin poçt indeksi, ünvanı və e-mail; məqalə yazılan dildə xülasə; açar sözlər çap edilir.

2. ƏDƏBİYYAT

Ədəbiyyat siyahısı məqalədə qeyd olunan ardıcılıqla və aşağıdakı qaydada yazılır:

- jurnal məqaləsi üçün: müəlliflərin adı, atasının adı və soyadı (nümunə: Ə.Ə.Əliyev), məqalənin adı, jurnalın adı, cild (seriya), nömrə, nəşr ili, səhifə (başlangıç və son);
- kitab və tezislər üçün: müəlliflərin adı, atasının adı və soyadı, kitabın, tezisin və konfransın tam adı, nəşr olunan yer və il, səhifələr.

3. XÜLASƏ

Xülasə ayrı vərəqdə digər 2 dildə çap edilir.

4. ŞƏKİLLƏR

Şəkillər (60x80mm-dən böyük və ya 125x160mm-dən kiçik formatda) ağ kağızda və CD kompakt diskdə JPG formatında verilməli, şəkilaltı yazılar ayrı vərəqdə çap olunmalıdır. Şəkillərdə aydınlaşdırıcı mətn və şəkilaltı ifadələr olmamalıdır. Qrafiklərin koordinat oxlarında kifayət qədər az sayda rəqəm olmalı, oxların adı iri və aydın ingilis dilində göstərilməlidir. Qrafikdə bir neçə əyri verildikdə onları nömrələməli və nömrələrin izahı şəkilaltı yazıarda verilməlidir. Şəkillərin sayı 5-dən çox olmamalıdır.

5. CƏDVƏLLƏR

Cədvəllər nömrələnib, adlandırılıb ayrıca vərəqdə təqdim olunur. Cədvəllərin ölçüləri 125x160mm və sayı 5-dən artıq olmamalıdır.

6. ÜNVAN

Azərbaycan, AZ 1143, Bakı, Hüseyn Cavid prospekti, 131, AMEA Fizika İnstitutu.

Tel: (99412) 539-33-15, E-mail: jtransactions@physics.ab.az; www.physics.gov.az

УДК 538.97; 539.23

УРОВЕНЬ ФЕРМИ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В СВЕРХРЕШЕТКАХ В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ С УЧЕТОМ СПИНОВОГО РАСПЩЕПЛЕНИЯ

С.Р.ФИГАРОВА, М.М.МАХМУДОВ

Бакинский Государственный Университет
AZ 1148, Баку, ул. З. Халилова, 23
figarov@bsu.az

Поступила: 20.02.2015

Принята к печати: 23.06.2015

РЕФЕРАТ

В данной работе теоретически исследуется плотность состояний и уровень Ферми двумерного электронного газа с косинусоидальным законом дисперсии в поперечном сильном магнитном поле с учетом спинового расщепления. Изучено поведение плотности состояний и уровня Ферми в зависимости от величины магнитного поля и g^* -фактора спинового расщепления. Показано, что плотность состояний и уровень Ферми осциллируют в магнитном поле, причем период осцилляций зависит от спинового расщепления и формы поверхности Ферми.

Ключевые слова: сверхрешетка, плотность состояний, уровень Ферми, магнитное поле, спиновое расщепление.

При наличии внешнего сильного магнитного поля у слоистых соединений, например, полупроводников типа A^3B^5 и искусственных сверхрешеток происходит квантование энергетического спектра носителей тока, в результате чего в низкоразмерных электронных системах появляется ряд новых явлений - осцилляции кинетических коэффициентов, отрицательное магнитосопротивление, эффект Капицы - линейный рост магнитосопротивления в магнитном поле [1-6]. Следует ожидать, что на эти явления существенно будет влиять спиновое расщепление [7]. Поведение этих явлений в низкоразмерных электронных системах в магнитном поле тесно связано с поведением плотности состояний и уровня Ферми. Поэтому в данной работе исследуется плотность состояний и уровень Ферми электронного газа с косинусоидальным законом дисперсии в поперечном сильном магнитном поле с учетом спинового расщепления. Найдена зависимость функции плотности состояний и уровня Ферми от величины

магнитного поля и g^* -фактора спинового расщепления. Показано, что поведение плотности состояний и уровня Ферми существенно зависит от соотношения между уровнем Ферми, уровнем Ландау и шириной мини-зоны. Рассмотрены два случая: когда энергия Ферми ζ_F больше ширины мини-зоны ε_0 ($\zeta_F > 2\varepsilon_0$ - поверхность Ферми открытая и имеет вид гофрированного цилиндра), и когда энергия Ферми ζ_F меньше ширины мини-зоны ε_0 ($\zeta_F < 2\varepsilon_0$ - поверхность Ферми закрытая). В этих конкретных случаях выявлено пикообразное поведение плотности состояний и уровня Ферми в магнитном поле, на которое существенно влияет спиновое расщепление и положение уровня Ферми относительно ширины мини-зоны. На основе известных данных для сверхрешетки GaAs /AlGaAs проведен численный расчет уровня Ферми в зависимости от величины магнитного поля.

Как известно, учет спина электрона приводит к дополнительному члену $\mu_z B$ в

гамильтониане, где $\mu_z = \mu_B(\sigma_z/\sigma)$ - проекция собственного магнитного момента на направление поля, связанная со спином электрона, σ_z - оператор спина с собственным значением $\pm 1/2$, $\mu_B = e\hbar/2m_0$ - магнетон Бора. Поскольку оператор спина коммутирует с гамильтонианом, то его z -я компонента сохраняется, и в уравнении Шредингера спиновые и координатные переменные разделяются. Поэтому полные собственные функции электрона с учетом спина получаются умножением волновых функций без спина на спиновые волновые функции, соответствующие определенным значениям проекции спина $\sigma = \pm 1/2$. При этом, к собственным значениям энергии прибавляется дополнительный член, соответствующий энергии собственного момента в магнитном поле. Тогда в сильном магнитном поле параллельном оси z , направленном перпендикулярно слоям, поле квантует движение электрона в плоскости слоя и снимает спиновое вырождение, приводя к энергетическому спектру в виде [5, 8]:

$$\varepsilon(N, k_z, \sigma) = (2N+1)\mu B + \varepsilon_0(1 - \cos ak_z) + g^* \sigma \mu_B B, \quad (1)$$

где N - номер уровня Ландау, k_z - составляющая волнового вектора вдоль оси z , B - индукция магнитного поля,

$\mu = (m_0/m_{\perp})\mu_B$, $\mu_B = e\hbar/2m_0$ - магнетон Бора, m_0 - масса свободного электрона, m_{\perp} - масса электрона в плоскости слоя, ε_0 - полуширина одномерной зоны проводимости в направлении k_z , a - постоянная решетки вдоль оси z , $\sigma = \pm 1/2$ спиновое квантовое число электрона, g^* - фактор спинового расщепления энергии электрона. Видно, что каждый уровень Ландау расщепляется на два спиновых подуровня, причем величина расщепления N -го уровня равна $\Delta\varepsilon = g^* \mu_B B$.

Следует отметить, что энергетический спектр (1) хорошо описывает электронный газ в слоистых кристаллах дихалькогенидов

переходных металлов, в полупроводниковых соединениях со сверхрешеткой и полупроводниковых гетероструктурах с глубокими ямами между большими барьерами.

Теперь определим плотность квантовых состояний электронов в магнитном поле. Одно квантовое состояние в магнитном поле определяется двумя квазинепрерывными (k_y, k_z) и двумя дискретными квантовыми числами N и σ . Поэтому полное число квантовых состояний единицы объема в магнитном поле равно [8]:

$$Z = \frac{L_y L_z}{V(2\pi)^2} \sum_{N\sigma} \int dk_y dk_z, \quad (2)$$

здесь L_y, L_z - соответствующие размеры объема, где находится электронный газ. Как известно, интеграл по dk_y в (2) имеет вид [8]:

$$\int dk_y = \frac{1}{R^2} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx_0 = \frac{L_x}{R^2},$$

где $x_0 = -R^2 k_y$, $R = (\hbar/eB)^{1/2}$ - магнитная длина. Используя это выражение, после перехода к интегралу по энергии, имеем:

$$Z = \frac{2}{(2\pi R)^2} \sum_{N\sigma} \int \frac{dk_z(\varepsilon, N, \sigma)}{d\varepsilon} d\varepsilon = \int g_B(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3)$$

где

$$g_B(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi R)^2} \sum_{N\sigma} \frac{dk_z(\varepsilon, N, \sigma)}{d\varepsilon} \quad (4)$$

плотность квантовых состояний в магнитном поле, множитель 2 учитывает тот факт, что энергия является четной функцией k_z . Для того чтобы найти явный вид плотности состояний надо исходить из конкретного закона дисперсии $k_z(\varepsilon, N, \sigma)$. В нашем случае он определяется формулой (1) и плотность состояний принимает вид:

$$g_B(\varepsilon) = \frac{1}{2(\pi R)^2 a} \sum_{N\sigma} (2\varepsilon_0 \varepsilon_z - \varepsilon_z^2)^{-1/2} = \\ = \frac{1}{2(\pi R)^2 a \varepsilon_0} \sum_{N\sigma} (\sin ak_z)^{-1}$$
(5)

здесь введено обозначение:

$$\varepsilon_z = \varepsilon(N, k_z, \sigma) - (2N+1)\mu B - g^* \sigma \mu_B B.$$

Выражение (5) находится в хорошем согласии с формулой, приведенной в работе [6]. Следует отметить, что плотность состояний имеет особенность каждый раз, когда $\varepsilon_z = 2\varepsilon_0$. При $\varepsilon_z > 2\varepsilon_0$ плотность состояний не зависит от энергии и линейно зависит от магнитного поля.

Численный расчет, проведенный на основе формулы (5), показывает, что в случае вырожденного электронного газа поведение плотности состояний существенно зависит от соотношения между уровнем Ферми и шириной одномерной зоны проводимости в направлении k_z . Учет спинового расщепления существенно влияет на поведение плотности состояния и при больших значениях g^* -фактора имеет место линейная зависимость плотности состояния от магнитного поля. Это следует и из формулы (5), так как при $\mu B > \varepsilon_0$ и $\mu_B B > \varepsilon_0$ - $ak_z = 2na\pi^2 R^2$.

Используя полученное выражение для плотности состояний, найдем зависимость уровня Ферми от магнитного поля. Для этого будем исходить из большого термодинамического потенциала квазидвумерного электронного газа в квантующем магнитном поле Ω [9]:

$$\Omega = -\frac{k_0 T V}{2(\pi R)^2} \sum_{N,\sigma} \int_{\varepsilon_1}^{\infty} \frac{dk_z(\varepsilon, N, \sigma)}{d\varepsilon} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\zeta - \varepsilon}{k_0 T} \right) \right] d\varepsilon, \quad (6)$$

где нижняя граница интегрирования $\varepsilon_1(N, \sigma)$ является корнем уравнения $k_z(\varepsilon_1, N, \sigma) = 0$. Проинтегрировав (6) один раз по частям, получим:

$$\Omega = -\frac{V}{2(\pi R)^2} \sum_{N,\sigma} \int_{\varepsilon_1}^{\infty} k_z(\varepsilon, N, \sigma) f_0(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (7)$$

Учитывая, что

$$n = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \zeta} \right)_{T,V,B}, \quad (8)$$

для концентрации электронного газа, так как $(\partial f_0 / \partial \zeta) = (-\partial f_0 / \partial \varepsilon_0)$, из (7) и (8) имеем:

$$n = \frac{1}{2(\pi R)^2} \sum_{N,\sigma} \int_{\varepsilon_1}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) k_z(\varepsilon, N, \sigma) d\varepsilon. \quad (9)$$

Из формулы (9) для вырожденного электронного газа с заданной концентрацией n имеем:

$$n = \frac{1}{2a(\pi R)^2} [\pi \theta(\zeta - 2\varepsilon_0) + z_0 \theta(2\varepsilon_0 - \zeta)], \quad (10)$$

где $\theta(x)$ - ступенчатая функция Хевисайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \frac{1}{2}, & x = 0, \\ 1, & x > 0 \end{cases}$$

а z_0 определяется как:

$$z_0 = \begin{cases} \pi, & \zeta_F > \varepsilon_0 \\ \arccos \left(1 + \frac{\mu B - \zeta_F}{\varepsilon_0} \right), & \zeta_F < \varepsilon_0 \end{cases}.$$

В квантовом пределе ($N = 0$), проведя суммирование по σ , из (10) для уровня Ферми получим:

$$\zeta_F - \mu B = \varepsilon_0 \left[1 - \cos(na\pi^2 R^2) \sqrt{1 - \left(\frac{g^* \mu_B B}{2\varepsilon_0} \right)^2} \frac{1}{\sin^2(na\pi^2 R^2)} \right]. \quad (11)$$

На основе формулы (11) была построена зависимость уровня Ферми от магнитного поля и показано, что при определенных значениях напряженности магнитного поля поведение уровня Ферми становится немонотонным и определяется величиной спино-

вого расщепления, шириной мини-зоны и концентрацией носителей тока (см. рис.4 для следующих параметров $\varepsilon_0 = 1 \text{ мэВ}$,

$a = 10 \text{ нм}$, $n = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ [10], $m_\perp = 0.2m_0$, $g^* = 0; 2; 5; 10$).

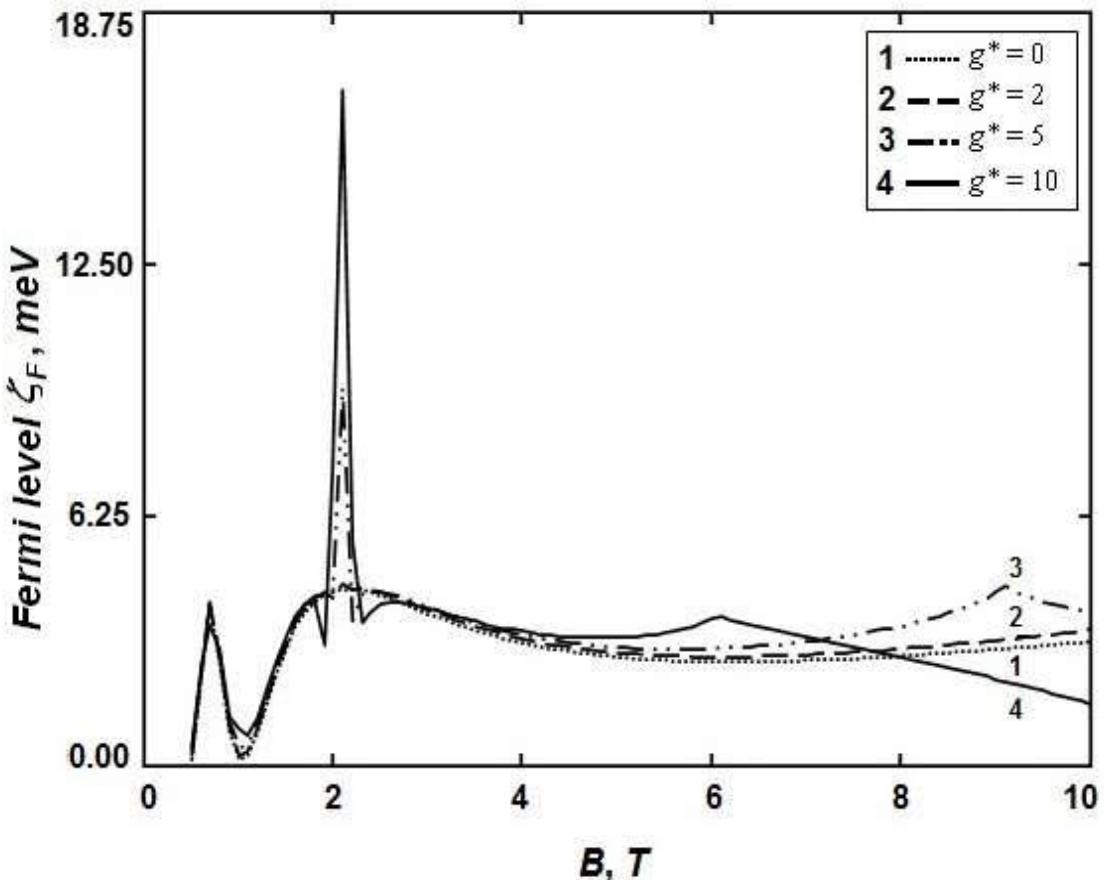


Рис.1.

Зависимость уровня Ферми от магнитного поля при учете спинового расщепления для различных значений g^* - фактора: 1 - $g^* = 0$; 2 - $g^* = 2$; 3 - $g^* = 5$; 4 - $g^* = 10$.

Из рис.1 видно, что в зависимости от магнитного поля уровень Ферми меняется немонотонно, имеет экстремумы, на величину и положение которых существенно влияет спиновое расщепление. Такое неординарное поведение уровня Ферми от магнитного поля при различных значениях спинового расщепления будет определять поведение кинетических коэффициентов. Следует, отметить, что, используя численный расчет и приведенные формулы, можно определить такие физические характеристи-

ки, как g^* -фактор спинового расщепления, зонные параметры сверхрешетки и области магнитного поля, где имеют место скачки плотности состояний и уровня Ферми. Так, при сравнении теоретических результатов с экспериментальными данными по положению и величине пиков осцилляций химического потенциала можно вычислить g^* -фактор и ширину минизоны сверхрешетки ε_0 .

1. П.Л.Капица. *Сильные магнитные поля*, М.: Наука, (1988) 254.
2. С.И.Борисенко. *Физика полупроводниковых наноструктур*, Изд-во Томского Политехнического Института, (2010) 114.
3. W.Zawadzki. *Magnetic and thermal properties of a two-dimensional electron gas*, *Physica B+C*, **127** (1984) 388-392.
4. B.M.Askerov, S.R.Figarova, M.M.Mahmudov. *Longitudinal magnetoresistance of layered crystals in a quantizing magnetic field taking into account the spin splitting*, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **33** (2006) 303-307.
5. V.T.Dolgopolov, A.Gold. *Magnetoresistance of a two-dimensional electron gas in parallel magnetic field*, *Письма в ЖЭТФ*, **71** (2000) 42-46.
6. В.Н.Луцкий, М.И.Каганов, А.Я.Шик. *О некоторых особенностях проводимости сверхрешеток в квантующем магнитном поле*, *ЖЭТФ*, **92** (1987) 721-729.
7. М.В.Якунин, Г.А.Альшанский, Ю.Г.Арапов, В.Н.Неверов, Г.И.Харус, Н.Г.Шелушинина, Б.Н.Звонков, Е.А.Ускова, А. де Виссер, Л.Пономаренко, *Стиновые эффекты в индуцированном параллельным магнитным полем магнитосопротивлении двойной квантовой ямы $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs}$* . *ФТП*, **39** (2005) 118-123.
8. B.M.Askerov. *Electron transport phenomena in semiconductors*, World Scientific, Singapore, (1994) 394.
9. B.M.Askerov, S.R.Figarova. *Thermodynamics, Gibbs Method and Statistical Physics of Electron Gases*, Springer-Verlag, Berlin, (2010) 374.
10. Yu.A.Pusep, G.M.Gusev, A.J.Chiquito, S.S.Sokolov, A.K.Bakarov, A.I.Toropov, J.R.Leite. *Vertical longitudinal magnetoresistance of semiconductor superlattices*, *Physical Review B*, **63** (2001) 165307-165312.

GÜCLÜ MAQNİT SAHƏSİNDE İFRATQƏFƏSLƏRDƏ SPİN PARÇALANMASI NƏZƏRƏ ALINMAQLA FERMİ SƏVİYYƏSİ

S.R.FİQAROVA, M.M.MAHMUDOV

İşdə spin parçalanması nəzərə alınmaqla eninə güclü maqnit sahəsində kosinusoidal dispersiya qanunlu elektron qazının hal sıxlığı nəzəri tədqiq olunmuşdur. Kvant halları sıxlığı funksiyası və Fermi səviyyəsinin maqnit sahəsinin qiymətindən və spin parçalanmasının g^* - faktorundan asılılıqları öyrənilmişdir. Göstərilmişdir ki, hal sıxlığı funksiyası və Fermi səviyyəsi maqnit sahəsində ossilyasiya edir. Bu ossilyasiyaların periodu isə spin parçalanması və Fermi səthinin formasından asılıdır.

FERMI LEVEL IN SUPERLATTICES IN STRONG MAGNETIC FIELD TAKING INTO ACCOUNT SPIN SPLITTING

S.R.FİQAROVA, M.M.MAHMUDOV

The density of states and the Fermi level of the two-dimensional electron gas with a cosine dispersion law in strong magnetic field with the spin splitting has been theoretically investigated. The behavior of the density of states and the Fermi level as a function of magnetic field and g^* - spin splitting factor have been studied. It has been shown that the density of states and the Fermi level has oscillated in a magnetic field and the period of oscillation has depended on the spin splitting and shape of the Fermi surface.

Редактор: акад. Ф.Гашимзаде

UOT 530.145.1

AdS/KXD-NİN YUMŞAQ DİVAR MODELİNDƏ ρ -MEZON-NUKLON-DELTA BARİON QARŞILIQLI TƏSİR SABİTİ

İ.İ.ATAYEV¹, N.C.HÜSEYNNOVA^{2,3}, Ş.Ə.MƏMMƏDOV³

Azərbaycan MEA Fizika İnstitutu¹

AZ 1143, Bakı, H.Cavid, 131

Nəzəri fizika kafedrası, Bakı Dövlət Universiteti²

AZ 1148, Bakı, akad. Z. Xəlilov küçəsi, 23

BDU Fizika Problemləri ETİ³

AZ 1148, Bakı, akad. Z. Xəlilov küçəsi, 23

atayevibrahim@gmail.com, nerminh236@gmail.com, sh.mamedov62@gmail.com

Daxil olub: 18.05.2015

Çapa verilib: 22.06.2015

REFERAT

AdS/KXD-nin yumşaq divar modelində ro-mezon ilə nuklonların və delta barionların qarşılıqlı təsir məsələsinə baxılmışdır. AdS fəzasının daxilində kalibrleşmə sahələri vasitəsilə vektor sahə təyin olunmuşdur. Bunnardan əlavə kiral simmetriyanı pozmaq üçün psevdoskalyar sahə daxil edilmişdir. Bu sahələr üçün AdS fəzasının daxilində Laqrانjian yazılmış, hərəkət tənlikləri alınmış və bu tənliklərin həlli olan profil funksiyaları təqdim edilmişdir. AdS/KSN uyğunluğuna əsaslanaraq $G_{\rho\Delta\Delta}$ qarşılıqlı təsir sabiti üçün əlavə ölçü üzrə integral ifadə alınmışdır.

GİRİŞ

AdS/KXD Anti-De-Sitter fəzası gravitasiya nəzəriyyəsi və Konformal sahə nəzəriyyəsi uyğunluğu əsasında qurulmuş modeldir. Enerjinin kiçik qiymətlərində həyəcanlaşma nəzəriyyəsinin tətbiqi mümkün olmadığından, Kvant Xromodinamikası üçün bu uyğunluğun böyük əhəmiyyəti vardır. Bu uyğunluğa görə 5 ölçülü Anti-de-Sitter fəzasının daxilində təyin olunmuş ixtiyarı sahəyə, bu fəzanın ultrabənövşəyi sərhəddində operator qarşı qoyulur. Sərhəddə təyin olunmuş Kvant Xromodinamikasındaki konfaynment xassəsi daxildəki AdS fəzası ilə 2 üsulla verilir ki, bunlar da AdS/KXD nəzəriyyəsinin modelləri adlanır [1,2] :

1)Sərt divar modelində fəzanın üzərinə kəskin (infraqırmızı) sərhəd şərti qoyulmaqla, nəzəriyyə məhdud oblastda qurulur. Sərt divar modeli mezonlar üçün xətti asılı olaraq artan kütlə spektri verir.

2)Yumşaq divar modelində 5 ölçülü integralın qiymətini sonlu etmək üçün təsirin ifadəsinə eksponensial vuruq şəklində Dilaton sahəsi daxil edilir. Yumşaq divar modeli mezonların kütləsinin kvadratı üçün xətti asılı olaraq artan spektr verir.

Hər iki modeldə güclü qarşılıqlı təsir zərrəcikləri üçün müxtəlif qarşılıqlı təsir sabitlərini, eləcə də onların form-faktorlarını hesablamaq mümkündür. AdS/KXD-nin hər iki modelində bu qarşılıqlı təsir sabitləri mezon və barionların həm əsas və həm də həyəcanlaşma halları üçün hesablanır. Qeyd edilən fiziki effektlər yumşaq və sərt divar modellərində vakuum halına əlavə olaraq, sonlu temperaturda və nüvə mühitində tədqiq edilir.

Zərrəciklər fizikasında ən yüngül vektor mezon ρ mezon olduğundan, AdS/QCD modellərində mezonların tədqiqinə bu mezondan başlanır. Bugunə qədər müxtəlif alımlar tərəfindən vakuumda ro-mezonun nuklonlarla və elcədə spin 3/2 olan delta barionlarla qarşılıqlı təsir sabiti [5] sərt divar modelində hesablanmışdır. Biz əvvəlki işlərimizdə yumşaq divar modelində anoloji olaraq vakuumda ro-mezonun

nuklonlarla [8] və elcədə spin 3/2 olan delta barionlarla [9] qarşılıqlı təsirini araşdırılmış və uyğun qarşılıqlı təsir sabitlərinin ədədi qiymətini hesablamışıq.

Təqdim olunan işdə ro mezon ilə nuklonların və delta barionların qarşılıqlı təsir məsələsi AdS/KXD-nin yumşaq divar modelində tədqiq edilmişdir. Qeyd edək ki, bu üçlü qarşılıqlı təsir sərt divar modelində araşdırılmışdır [5]. Vektor mezon-nuklon-delta barion qarşılıqlı təsir sabitinin təcrubi qiyməti məlum olmadığından biz bu güclü qarşılıqlı təsir sabiti üçün yalnız beşinci ölçü üzrə integral ifadə almaqla kifayətlənmişik. Sonra isə aldığımız ifadəni sərt divar modelində alınan integral ifadə ilə müqayisə etmişik.

Məqalədə yumşaq divar modeli çərçivəsində spin 3/2 olan delta barionlar üçün AdS fəzasının daxilində Laqrانjian yazılmış, hərəkət tənlikləri alınmış və bu tənliklərin həlli olan profil funksiyaları tapılmışdır.

Anti-de-Sitter Konformal Sahə Nəzəriyyəsi uyğunluğuna əsaslanaraq daxili fəzada yazılmış qarşılıqlı təsir Lagranjianlarından istifadə edərək AdS fəzasının daxilində ro mezon-nuklon-delta barion qarşılıqlı təsir sabiti üçün əlavə ölçü üzrə integral ifadə alınmış və baxdığımız nəzəriyyənin sərt divar modeli adlanan AdS/KXD -nin digər modelindən alınan əlavə ölçü üzrə integral ifadə ilə müqayisə etmişik.

YUMŞAQ DIVAR MODELİ

Bu modeldə 5 ölçülü integralın qiymətini sonlu etmək üçün təsirin ifadəsinə eksponensial vurug şəklində Dilaton sahəsi daxil edilir və təsir (1) dusturu ilə təyin olunur:

$$I = \int d^5x \sqrt{g} e^{-\Phi} \mathcal{L}, \quad (1)$$

burada $g = |\det g_{MN}|$ ($M,N=0,1,2,3,5$) və AdS fəzasının metrikası aşağıdakı şəkildə təyin olunur:

$$(2) \quad ds^2 = \frac{1}{z^2} (-dz^2 + \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu), \quad \mu, \nu = 0, 1, 2, 3, \\ g_{MN} dx^M dx^N = e^{2A(z)} (dz^2 + \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu),$$

burada $\Phi = \Phi(z)$ Dilaton sahəsi və $\eta_{\mu\nu}$ isə Minkovski metrikasıdır:

$$\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1). \quad (3)$$

Dilaton sahəsi elə seçilir ki, infraqırmızı sərhəddə 5-ölçülü integrallı sonlu ($z \rightarrow \infty$) olsun. Belə sahənin ən sadə halı aşağıdakı şəkildədir

$$\Phi - A = k^2 z^2 + \log z. \quad (4)$$

YUMŞAQ DIVAR MODELİNDƏ RO-MEZON

AdS fəzasının daxilində 2 ədəd A_L^M və A_R^M kalibrleşmə sahələri vardır ki, bunlar da $SU(2)_L \times SU(2)_R$ kiral simmetriya qrupuna tabe olaraq sol və sağ kiral sahələr kimi çevrilir. İç fəzada kalibrleşmə sahələrindən başqa bir skalyar X sahəsi də var ki, bu sahənin A_L^M və A_R^M kalibrleşmə sahələri ilə qarşılıqlı təsiri nəticəsində kiral simmetriya pozulur. Skalyar X sahəsi $SU(2)_L \times SU(2)_R$ qrupunun bifundamental təsviri kimi çevrilir. Vektori sahələr üçün Anti De Sitter Konformal Sahə Nəzəriyyəsi prinsipinə görə vektori sahənin Kaluza-Kleyn modalarının ultrabənövşəyi sərhəddəki qiyməti vektor mezonların hallarına uyğun gelir. Zərrəciklər fizikasında ən yüngül mezon ρ mezon olduğundan, Kaluza-Kleyn modasının birinci həyəcanlaşma səviyyəsinə ρ mezon uyğun gelir [3,4]. Bütün bu sahələr üçün yekun təsir belə olur:

$$I = \int d^5x e^{-\Phi(z)} \sqrt{g} \left\{ -|DX|^2 + 3|X|^2 - \frac{1}{4g_5^2} (F_L^2 + F_R^2) \right\}, \quad (5)$$

burada 5-ölçülü qarşılıqlı təsir sabiti rəng yükündən asılıdır:

$$g_5^2 = \frac{12\pi^2}{N_c} = 2\pi.$$

Bu iki kalibrəşmə sahələrini toplayaraq yekun vektori sahə alarıq: $V = \frac{1}{\sqrt{2}}(A_L + A_R)$. Sadəlik üçün biz $V_5 = 0$ kalibrovkasında işləyəcəyik. Təsirin (5) ifadəsindən təyin olunan vektori sahə üçün hərəkət tənliyi aşağıdakı şəkildədir

$$\partial_z(e^{-B}\partial_z v_n) + m_n^2 e^{-B} v_n = 0, \quad (6)$$

burada $B = \Phi - A$. Aşağıdakı əvəzlənməni apardıqdan sonra,

$$v_n = e^{B/2} \psi_n \quad (7)$$

(6) tənliyi Şredinger tənliyinə bənzər tənliyə gətirilir

$$-\Psi_n'' + \left(z^2 + \frac{3}{4z^2}\right) \Psi_n = m_n^2 \Psi_n. \quad (7'')$$

(7) bu tənliyin həlli aşağıdakı şəkildə olur

$$\psi_n(z) = e^{-k^2 z^2/2} (kz)^{m+1/2} \sqrt{\frac{2n!}{(m+n)!}} L_n^m(k^2 z^2), \quad (8)$$

burada $L_n^m(k^2 z^2)$ Lager polinomudur.

ρ -mezon üçün $m = 1$ və (8) həlli (9) şəklində olur

$$V_n(z) = k^2 z^2 \sqrt{\frac{2}{(1+n)}} L_n^1(k^2 z^2). \quad (9)$$

Həyəcanlaşmış hallar üçün kütlə spektri n -dən xətti asılı olur

$$m_n^2 = 4k^2(n+\infty). \quad (10)$$

YUMŞAQ DIVAR MODELINDƏ NUKLONLAR

İşdə əsas məqsədimiz sərhəddəki vektor spinorlarını təsvir etmək üçün 5 ölçülü daxili fəzada 1 cüt spinor daxil etməkdir. Sərhəddəki O_L və O_R nuklonlar $SU(2)_L \times SU(2)_R$ qrupunun təsiri altında müxtəlif cür çevrildiyindən 5 ölçülü fəzada O_L və O_R -ə uyğun olaraq 2 ədəd 5 ölçülü vektor spinorlar daxil edilir. Bu zaman təsir aşağıdakı şəkildə yazılır

$$S_F = \int d^4x dz \sqrt{g} e^{-\Phi(z)} \left(\frac{i}{2} \bar{\Psi}_1 e_A^N \Gamma^A D_N \Psi_1 - \frac{i}{2} (D_N \Psi_1)^+ \Gamma^0 e_A^N \Gamma^A \Psi_1 - (M + \Phi(z)) \bar{\Psi}_1 \Psi_1 \right) \quad (11)$$

burada $e_A^N = z \delta_A^N$ əyrixətli fəzadan düzxətli fəzaya keçid veylbeyni adlanır və $g^{MN} = e_A^M e_B^N \eta^{AB}$. $D_N = \partial_N + \frac{1}{8} \omega_{N AB} [\Gamma^A, \Gamma^B]$ isə kovariant törəmdir. Spin rəbitənin sıfırdan fərqli komponentləri aşağıdakılardır

$$\omega_{\mu z v} = -\omega_{\mu v z} = \frac{1}{z} \eta_{\mu v}.$$

$$\{\Gamma^A, \Gamma^B\} = 2\eta^{AB}, \quad \Gamma^A = (\gamma^\mu, -i\gamma^5)$$

isə 5-ölçülü qamma matrislərdir.

Təsirin (11) ifadəsindən hərəkət tənliyi aşağıdakı şəkildə tapılır

$$[ie_A^N \Gamma^A D_N - \frac{i}{2} (\partial_N \Phi) e_A^N \Gamma^A - (M + \Phi(z))] \Psi_1 = 0. \quad (12)$$

(12) ifadəsindən profil funksiyalar üçün aşağıdakı tənliklər sistemi alınır:

$$\begin{aligned} \left[\partial_z^2 - \frac{\frac{2(M+k^2 z^2)}{z}}{z} \partial_z + \frac{\frac{2(M-k^2 z^2)}{z^2}}{z^2} + p^2 \right] f_{1R} &= 0, \\ \left[\partial_z^2 - \frac{\frac{2(M+k^2 z^2)}{z}}{z} \partial_z + p^2 \right] f_{1L} &= 0. \end{aligned}$$

Bu tənliklər sisteminin həlli Lager polinomu ilə aşağıdakı şəkildə tapılır

$$\begin{aligned} f_{1L}^{(n)}(z) &= n_{1L} \xi^\alpha L_n^{(\alpha)}(\xi), \\ f_{1R}^{(n)}(z) &= n_{1R} \xi^{\alpha-\frac{1}{2}} L_n^{(\alpha-1)}(\xi). \end{aligned} \quad (13)$$

(13) ifadələrindəki normallaşma sabitləri üçün normallaşma şərtindən qamma funksiyalar vasitəsilə aşağıdakı ifadələr tapılmışdır

$$\begin{aligned} n_{1L} &= \frac{1}{k^{\alpha-1}} \sqrt{\frac{2\Gamma(n+1)}{\Gamma(\alpha+n+1)}}, \\ n_{1R} &= n_{1L} \sqrt{\alpha+n} \end{aligned}$$

α parametrinin ədədi qiyməti 5-ölcülü kütlə $M = \frac{3}{2}$ ilə $\alpha = M + \frac{1}{2}$ ifadəsindən $\alpha=2$ tapılır.

YUMŞAQ DIVAR MODELİNDƏ DELTA BARİONLAR

İndi AdS fəzasının sərhəddində delta barion sahələrini təsvir etmək üçün spini 3/2 olan Rarita-Şvinger sahəsi daxil edək. İsdə əsas məqsədimiz sərhəddəki vektor spinorları təsvir etmək üçün 5 ölçülü iç fəzada 2 ədəd vektor spinor daxil etməkdir.

Sərhəddəki O_L və O_R Spini 3/2 olan kiral barion operatorları $SU(2)_L \times SU(2)_R$ qrupunun təsiri altında müxtəlif cür çevrildiyindən 5 ölçülü fəzada 2 ədəd 5 ölçülü vektor spinorlar daxil edilir[5,6].

Spin 3/2 barionların KXD-nin sərhəddindəki təsviri AdS fəzasında Ψ_M Rarita-Şvinger sahəsi ilə verilir. AdS fəzasında Rarita -Şvinger sahəsi üçün təsir aşağıdakı ifadə ilə təyin olunur

$$S_F = \int d^5x \sqrt{g} e^{-\Phi(z)} \left(i\bar{\Psi}_A \Gamma^{ABC} D_B \Psi_C - (m_1 + \frac{\Phi}{2}) \bar{\Psi}_A \Psi^A - (m_2 - \frac{\Phi}{2}) \bar{\Psi}_A \Gamma^{AB} \Psi_B \right) \quad (14)$$

$\Psi_A = e_A^N \Psi_N$, $e_A^N = z \delta_A^N$ əyrixətli fəzadan düzxətli fəzaya keçid veylbeyni adlanır və $g^{MN} = e_A^M e_B^N \eta^{AB}$ münasibətini ödəyir. $D_N = \partial_N + \frac{1}{8} \omega_{NAB} [\Gamma^A, \Gamma^B] - iV_N$ isə kovariant törəmədir.

Təsirin (14) ifadəsindən hərəkət tənliyi aşağıdakı şəkildə tapılır

$$i\Gamma^A (D_A \Psi_B - D_B \Psi_A) - (m_- + \Phi) \Psi_B + \frac{m_+}{3} \Gamma_B \Gamma^A \Psi_A = 0. \quad (15)$$

Məlum olduğu kimi Rarita-Şvinger sahəsinin spini 3/2 komponentləri spini 1/2 olan sahənin də hallarını özündə saxlayır. 4 ölçülü fəzada bu sahənin üzərinə Lorens şərti qoymaqla spini 1/2 olan komponentlər aradan qaldırılır

$$\gamma^\mu \Psi_\mu = 0.$$

5-ölcülü fəzada da Rarita-Şvinger sahəsinin üzərinə Lorens şərti qoymaqla spini 1/2 olan komponentlər Rarita-Şvinger sahəsində aradan qaldırılır

$$e_A^M \Gamma^A \Psi_\mu = 0, \quad (16)$$

bu da sərbəst zərrəcik üçün aşağıdakı tənliyə gətirir.

$$\partial^M \Psi_M = 0 . \quad (17)$$

Beləliklə Rarita-Şvinger sahəsi üçün Dirak tənliyinə bənzər aşağıdakı tənlik alınır [5]

$$(iz\Gamma^A\partial_A + 2i\Gamma^5 - (m_- + \Phi))\Psi_\mu = 0, (\mu = 0,1,2,3). \quad (18)$$

(18) tənliyindən istifadə etməklə profil funksiyalar üçün ikinci tərtib tənliklər alınmışdır

$$\begin{aligned} \left[\partial_z^2 - \frac{2(m_- + k^2 z^2)}{z} \partial_z + \frac{2(m_- - k^2 z^2)}{z^2} + p^2 \right] f_R &= 0, \\ \left[\partial_z^2 - \frac{2(m_- + k^2 z^2)}{z} \partial_z + p^2 \right] f_L &= 0. \end{aligned}$$

Bu tənliklər sisteminin həlli Lager polinomu ilə aşağıdakı şəkildə tapılır [7,8]

$$\begin{aligned} F_{1L}^{(n)}(z) &= n_{1L} \xi^\alpha L_n^{(\alpha)}(\xi), \\ F_{1R}^{(n)}(z) &= n_{1R} \xi^{\alpha - \frac{1}{2}} L_n^{(\alpha-1)}(\xi), \end{aligned} \quad (19)$$

burada α parametri 5 ölçülü kütlə ilə $\alpha = m_- + \frac{1}{2}$ şəklində təyin olunur.

(19) ifadələrindəki normallaşma sabitləri

$$\int_0^\infty \frac{dz}{z^{2m_-}} e^{-k^2 z^2} F_{1L}^{(n)}(z) F_{1L}^{(m)}(z) = \delta_{nm}$$

normallaşma şərtindən aşağıdakı şəkildə təyin olunur [9,10]

$$\begin{aligned} n_L &= \frac{1}{k^{\alpha-1}} \sqrt{\frac{2\Gamma(n+1)}{\Gamma(\alpha+n+1)}}, \\ n_R &= n_L \sqrt{\alpha + n} \end{aligned} \quad (20)$$

burada $|m_-| = \frac{5}{2}$ və beləliklə də $\alpha = 3$ təyin edirik. Normallaşma sabitlərinin əsas hal üçün qiymətləri isə $|n_L| = 4.4$, $|n_R| = 7.67$ tapılmışdır.

YUMŞAQ DIVAR MODELINDƏ RO-MEZON-NUKLON-DELTA BARION QARŞILIQLI TƏSIR SABITI

İç fəzada delta barionların və nuklonların vektori sahə ilə qarşılıqlı təsiri I təsirlə ifadə olunur:

$$I = \int d^5x e^{-\Phi(z)} \sqrt{g} \mathcal{L}_{\rho N\Delta} . \quad (21)$$

Lagranjian vektori sahənin nuklon cərəyanı ilə barion cərəyanının qarşılıqlı təsiri həddindən ibarətdir.

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\rho N\Delta} &= \alpha_1 (\bar{\Psi}_1^M \Gamma^N (F_L)_{MN} N_1 - \bar{\Psi}_2^M \Gamma^N (F_R)_{MN} N_2) + \\ &+ i\alpha_2 ((\partial^M \bar{\Psi}_1^N) (F_L)_{MN} N_1 + (\partial^M \bar{\Psi}_2^N) (F_R)_{MN} N_2) + \\ &+ i\alpha_3 (\bar{\Psi}_1^M (\partial^N (F_L)_{MN}) N_1 + \bar{\Psi}_2^M (\partial^N (F_R)_{MN}) N_2) + \\ &+ \beta_1 \left(\bar{\Psi}_1^M \Gamma^{NP} (\tilde{F}_L)_{MNP} N_1 - \bar{\Psi}_2^M \Gamma^{NP} (\tilde{F}_R)_{MNP} N_2 \right) + \\ &+ i\beta_2 \left((\partial^M \bar{\Psi}_1^N) \Gamma^P (\tilde{F}_L)_{MNP} N_1 + (\partial^M \bar{\Psi}_2^N) \Gamma^P (\tilde{F}_R)_{MNP} N_2 \right) + \\ &+ \tilde{\alpha}_1 (\bar{\Psi}_1^M \Gamma^N (F_L)_{MN} X N_2 + \bar{\Psi}_2^M \Gamma^N (F_R)_{MN} X N_1) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + i\tilde{\alpha}_2 \left((\partial^M \bar{\Psi}_1^N) (F_L)_{MN} XN_2 - (\partial^M \bar{\Psi}_2^N) (F_R)_{MN} XN_1 \right) + \\
& + i\tilde{\alpha}_3 (\bar{\Psi}_1^M (\partial^N (F_L)_{MN}) XN_2 - \bar{\Psi}_2^M (\partial^N (F_R)_{MN}) XN_1) + \\
& + \tilde{\beta}_1 \left(\bar{\Psi}_1^M \Gamma^{NP} (\tilde{F}_L)_{MNP} XN_2 + \bar{\Psi}_2^M \Gamma^{NP} (\tilde{F}_R)_{MNP} XN_1 \right) + \\
& + i\tilde{\beta}_2 \left((\partial^M \bar{\Psi}_1^N) \Gamma^P (\tilde{F}_L)_{MNP} XN_2 - (\partial^M \bar{\Psi}_2^N) \Gamma^P (\tilde{F}_R)_{MNP} XN_1 \right). \tag{22}
\end{aligned}$$

(22) Lagranjiani bu qarşılıqlı təsir üçün aşağıdakı integral ifadəni verir

$$\begin{aligned}
g_{\rho N\Delta}^{nm} = & \int_0^\infty dz e^{-\Phi(z)} \left[\frac{V_0(z)}{z^2} \left(k_1 (F_{1L}^{(n)*}(z) f_{1R}^{(m)}(z) - F_{2L}^{(n)*}(z) f_{2R}^{(m)}(z)) + \right. \right. \\
& + \tilde{k}_1 v(z) (F_{1L}^{(n)*}(z) f_{2R}^{(m)}(z) + F_{2L}^{(n)*}(z) f_{1R}^{(m)}(z))) + \frac{V_0(z)}{z} \left(\alpha_2 ((\partial_z F_{1L}^{(n)*}(z)) f_{1R}^{(m)}(z) + \right. \\
& + (\partial_z F_{2L}^{(n)*}(z)) f_{2R}^{(m)}(z)) + \tilde{\alpha}_2 v(z) ((\partial_z F_{1L}^{(n)*}(z)) f_{2R}^{(m)}(z) - (\partial_z F_{2L}^{(n)*}(z)) f_{1R}^{(m)}(z)) - \\
& - \frac{V_0(z)}{z} \left(\alpha_3 (F_{1L}^{(n)*}(z) f_{1R}^{(m)}(z) + F_{2L}^{(n)*}(z) f_{2R}^{(m)}(z)) + \tilde{\alpha}_3 v(z) (F_{1L}^{(n)*}(z) f_{2R}^{(m)}(z) - \right. \\
& - F_{2L}^{(n)*}(z) f_{1R}^{(m)}(z))) - 2m_\Delta \frac{V_0(z)}{z} \left(\beta_2 (F_{1L}^{(n)*}(z) f_{1L}^{(m)}(z) + F_{2L}^{(n)*}(z) f_{2L}^{(m)}(z)) + \right. \\
& \left. \left. + \tilde{\beta}_2 v(z) (F_{1L}^{(n)*}(z) f_{2L}^{(m)}(z) - F_{2L}^{(n)*}(z) f_{1L}^{(m)}(z))) \right) \right] \tag{23}
\end{aligned}$$

burada $V_0(z) = (kz)^2 \sqrt{2} L_0^{(1)}(k^2 z^2)$ əsas hal üçün ro-mezonun profil funksiyası, $F_{iL,R}$ delta barionlar üçün, $f_{iL,R}$ isə nuklonlar üçün profil funksiyalarıdır, $v(z) = \frac{1}{2} m_Q z + \frac{1}{2} \sigma z^3$, $k_1 = \alpha_1 - 4\beta_1$ və $\tilde{k}_1 = \tilde{\alpha}_1 - 4\tilde{\beta}_1$ sabit əmsallardır.

n, m indeksləri barionların və nuklonların həyəcanlaşma halını göstərir. K sərbəst parametrinin qiyməti yumşaq divar modelində nuklonların əsas hal üçün kütlə spektrinin qiymətindən təyin olunaraq $k=0.389$ GeV fiksə edilmişdir.

(23) ifadəsi AdS/KXD-nin yumşaq divar modelində Ro-mezon-nuklon-delta barion qarşılıqlı təsir sabiti üçün integral ifadədir.

NƏTİCƏ

Təqdim olunan işdə ro mezon ilə nuklonların və delta barionların qarşılıqlı təsir məsələsi AdS/KXD-nin yumşaq divar modelində tədqiq edilmişdir.

Məqalədə yumşaq divar modeli çərçivəsində spin 3/2 olan delta barionlar üçün AdS fəzasının daxilində Laqrانjian yazılmış, hərəkət tənlikləri alınmış və bu tənliklərin həlli olan profil funksiyaları tapılmışdır. Məlum olmuşdur ki, spin 3/2 olan delta barionlar üçün AdS/KXD-nin yumşaq divar modelində tapılan profil funksiyalar nuklonlar üçün olan profil funksiyalarla eynidir, bu funksiyalar bir-birindən yalnız α parametrinin ədədi qiyməti ilə fərqlənir. Bu parametr beş ölçülü kütlə ilə təyin olunduğundan onun ədədi qiyməti nuklonlar üçün $\alpha=2$, spin 3/2 olan delta barionlar üçün isə $\alpha=3$ olmuşdur.

Vektor mezon-nuklon-delta barion qarşılıqlı təsir sabitinin təcrübi qiyməti məlum olmadığından biz bu güclü qarşılıqlı təsir sabiti üçün yalnız beşinci ölçü üzrə integral ifadə almaqla kifayətlənmişik. Sonra isə aldığımız ifadəni sərt divar modelində alınan integral ifadə ilə müqayisə etmişik. Nəticələr göstərir ki, baxdığımız yumşaq divar modelində alınan integralaltı ifadə, sərt divar modelindən yalnız Dilaton vuruğu ilə fərqlənir. Bu da aldığımız nəticənin digər modeldən alınan nəticə ilə eyni olduğunu göstərir.

1. J.Erlich, E.Katz, D.T.Son, M.A.Stephanov. *QCD and a Holographic Model of Hadrons*, Physics Review Letters, **95** (2005) 261602.
2. A.Karch, E.Katz, D.T.Son, M.A.Stephanov. *Linear confinement and AdS/QCD*, Physics Review D, **74** (2006) 015005.
3. Z.Abidin, C.Carlson. *Nucleon electromagnetic and gravitational form factors from holography*, Physics Review D, **79** (2009) 115003.
4. H.R.Grigoryan, A.V.Radyushkin. *Structure of Vector Mesons in Holographic Model with Linear Confinement*, Physics Review D, **76** (2007) 095007.
5. H.C.Ahn, D.K.Hong, C.Park, S.Siwach. *Spin 3/2 Baryons and Form Factors in AdS/QCD*, Physics Review D, **80** (2009) 054001.
6. D.K.Hong, T.Inami, H.U.Yee. *Baryons in AdS/QCD*, Physics Letters B, **646** (2007) 165-171.
7. T.Gherghetta, J.I.Kapusta, T.M.Kelley. *Chiral symmetry breaking in soft-wall AdS/QCD*, Phys. Rev. D, **79** (2009) 076003.
8. N.Huseynova, Sh.Mamedov. *Rho meson-nucleon coupling constant from the soft-wall AdS/QCD model*, [arxiv: 1408. 5496] International Journal of Theoretical Physics (online first) 2015, DOI: 10.1007/s10773-015-2617-z (2015)
9. İ.İ. Atayev, N.C.Hüseynova, Ş.Ə.Məmmədov. *AdS/KXD-nin yumşaq divar modelində ro-meson-delta bariyon qarşılıqlı təsir sabiti*, Journal of Qafqaz University, **3 №1** (2015) 80-85.

**ρ-MESON- NUCLEON-DELTA BARYON COUPLING CONSTANT
FOR THE SOFT-WALL AdS/QCD MODEL**

I.I.ATAYEV, N.J. HUSEYNOVA, Sh.A.MAMEDOV

The rho-meson-nucleon Δ -baryon interaction in the soft-wall model of AdS/QCD has been considered. The vector field has been determined by the gauge fields in the bulk of Anti-de Sitter (AdS) space. In addition, the bulk was included the pseudoscalar field for breaking of chiral symmetry. The Lagrangian and equations of motion has been written in the bulk of AdS space for these fields and the profile function has been found from the solution of equations. According AdS/CFT an integral over an extra dimension for the $\rho_{\mu N \Delta}$ coupling constant has been derived.

**КОНСТАНТА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ρ-МЕЗОНА С НУКЛОНом И ДЕЛЬТА БАРИОНом
В МОДЕЛИ МЯГКОЙ СТЕНЫ АдС/ КХД**

И.И.АТАЕВ, Н.Дж.ГУСЕЙНОВА, Ш.А.МАМЕДОВ

Рассмотрено взаимодействие ро-мезона с нуклоном и дельта барионами в модели мягкой стены АдС/КХД. С помощью калибровочных полей внутри пространства Анти-де-Ситтера (АдС) определены векторные поля. Дополнительно, внутри пространства АдС введено псевдоскалярное поле для нарушения хиральной симметрии. Внутри пространства АдС записан Лагранжиан для этих полей и найдены профильные функции, которые являются решениями уравнения движения. Согласно АдС/КТП мы получили константу взаимодействия $\rho_{\mu N \Delta}$ в качестве интеграла по дополнительному измерению.

Редактор: проф. Ш.Нагиев

UOT: 544.174.2, 544.225.23

TlInS₂ KRİSTALININ TƏMƏL PRİNСİPLƏRDƏN ELEKTRON SPEKTRİNİN VƏ HAL SIXLİĞİNIN HESABLANMASI

N.A.İSMAYILOVA¹, H.S.ORUCOV^{1,2}

Azərbaycan MEA-nin Fizika İnstitutu¹

AZ 1143, Bakı, H.Cavid 131

Azərbaycan Texniki Universiteti²

AZ 1073, Bakı, H. Cavid 25

ismayilova_narmin_84@mail.ru

Daxil olub: 18.05.2015

Çapa verilib: 22.06.2015

REFERAT

Məqalədə ilk dəfə olaraq taməl prinsiplərdən TlInS₂ kristalının elektron zona quruluşu və hallar sixlığı hesablanmış, zonaların atom mənşəyi araşdırılmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, valent zonasının tavanı və keçiricilik zonasının dibi Brillüen zonasının mərkəzində yerləşir. İsdə həmçinin spin-orbital qarşılıqlı təsiri nəzərə alınması ilə zona quruluşunda baş verən dəyişikliklər araşdırılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, spin-orbital parçalanmalar əsasən T-Z simmetriya xətti üzrə baş verib valent zonalarının quruluşunda nəzərə çarpan dəyişikliklərə görətir və ümumiyyətlə qadağan zolaq ətrafindakı hallara ciddi təsir göstərmir. Maksimal parçalanma ~0.3eV olub keçirici zonanın aşağı hissələrində müşahidə olunur. Γ , T, Y və Z simmetriya nöqtələrində parçalanmalar yoxdur.

GİRİŞ

TlInS₂ $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ qrupundan olub otaq temperaturunda monoklin qəfəsdə kristallaşan və C2/c fəza simmetriyasına malik yarımkəcərici birləşmədir [1]. Bu sinif kristalların başlıca xüsusiyyəti, mərkəzində Tl⁺ kationu yerləşmiş MeCh₄ tetrahedronlardan ibarət laylı struktura malik olmasıdır (burada Me metal Ch halkogen atomlardır). TlInS₂ birləşməsində aşağı temperaturlarda 198K və 216K faza keçidlərinin olması hesabına onun elektron spektrində fundamental udma kənarı yaxınlığında temperaturdan asılı anomaliyalar müşahidə olunur [2]. Bu və başqa xüsusiyyətlərin olması birləşməyə olan marağın artırılmış və bir sırə işlərdə onun müxtəlif xassələri araşdırılmışdır [3].

HESABLAMA METODU VƏ ÖZƏLLİKLƏRİ

Təqdim olunan məqalədə birləşmənin elektron zona quruluşu və hallar sixlığı hesab-

lamaları Sixlıq Funksionalı Nəzəriyyəsi (DFT-Density Functional Theory) [4] çərçivəsində yerinə yetirilmişdir. Nəzəriyyənin Lokal Sixlıq Yaxınlaşması (LDA—Local Density Approximation) [5] Quantum Wise – Atomistix Tool Kit [6], Spin Ümumiləşdirilmiş Qradient yaxınlaşması (SGGA –Spin Generalized Density Approximation) isə [7] Quantum-Espresso program təminatları [8] vasitəsilə həyata keçirilmişdir. Elektron-ion qarşılıqlı təsirinin nəzərə alınması LDA yaxınlaşmasında normaqrəyən HGH (Hartwigsen-Goedecker-Hutter), SGGA yaxınlaşmasında isə ultrayumuşaq relativistik psevdopotensialları ilə yerinə yetirilmişdir. Qeyd etmək lazımdır ki, kristalın zona quruluşuna spin-orbital qarşılıqlı təsirinin nəzərə alınmasında Tl üçün istifadə olunmuş tam relyativistik psevdopotensial mövcud elmi ədəbiyyatda rast gəlinmir və ilk dəfə olaraq tərəfimizdən Quantum-Espresso proqramlar paketinə daxil olan ld1.x proqram modulu ilə hesablanıb sınaqdan keçilmişdir. TlInS₂

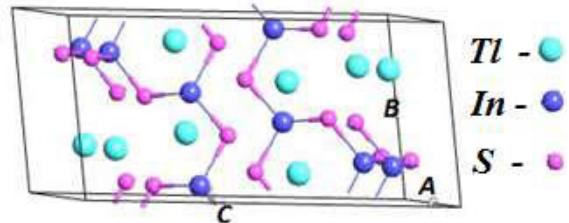
kristalı bazaya mərkəzləşmiş monoklin qəfəsə malik olub primitiv özəyi 32 atomdan ibarətdir (Şəkil 1). Kristalı təşkil edən atomların elektron konfiqurasiyaları (özək+valent elektronları) Tl üçün $[Xe]4f^{14} + 5d^{10} 6s^2 6p^1$, In üçün $[Kr] + 4d^{10} 5s^2 5p^1$ və S üçün $[Ne] + 3s^2 3p^4$ kimi seçilmiş və göründüyü kimi, Tl atomunun 13 ədəd $5d^{10} 6s^2 6p^1$, In atomunun 13 ədəd $4d^{10} 5s^2 5p^1$ və S atomunun 6 ədəd $3s^2 3p^4$ elektronları valent elektronları kimi baxılmışdır.

HESABLAMALARIN NƏTİCƏLƏRİ

$TlInS_2$ kristalı üçün strukturun optimallaşdırılması zamanı atomlararası qarşılıqlı təsir qüvvəsinin maksimal qiyməti $0.0001\text{eV}/\text{\AA}$, mexaniki gərginlik tensorunun maksimal qiyməti isə $0.0001\text{eV}/\text{\AA}^3$ -dan kiçik olmuşdur. Kristalın qəfəs parametrlərinin optimallaşdırılmış qiymətləri ($a=10.800\text{\AA}$, $b=10.845\text{\AA}$, $c=15.054\text{\AA}$, $\beta=100.375^\circ$) təcrübi nəticələrlə ($a=10.90\text{\AA}$, $b=10.90\text{\AA}$, $c=15.19\text{\AA}$, $\beta=100.55^\circ$) [9] yaxşı uyğunluq təşkil edərək onlardan $\sim 1\%$ fərqlənilər. Primitiv özəyə daxil olan və qeyri-ekvivalent mövqelərdə yerləşmiş atomların optimallaşdırmadan alınan koordinatları Cədvəl 1-də \vec{t}_1 , \vec{t}_2 , \vec{t}_3 bazisində verilmişdir. Burada \vec{t}_1 , \vec{t}_2 , \vec{t}_3 bazaya mərkəzləşmiş monoklin qəfəsinin bazis vektorlarıdır:

$$\vec{t}_1 = \left(\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, 0 \right); \vec{t}_2 = \left(-\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, 0 \right); \vec{t}_3 = (c \cos \beta, 0, \sin \beta).$$

Qeyd edək ki, primitiv özəyə daxil olan digər 23 ədəd atomun koordinatları cədvəldə verilmiş atomların koordinatlarından simmetriya çevirmələri ilə alınır.



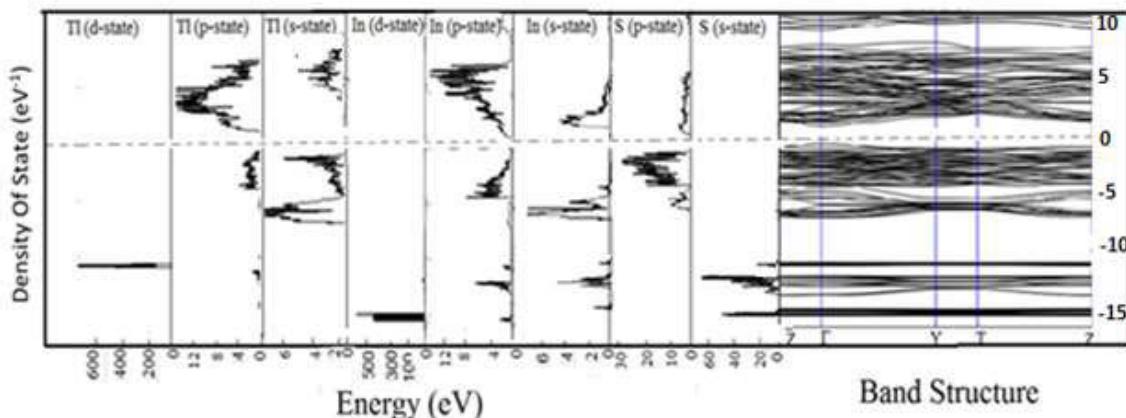
Şəkil 1.
 $TlInS_2$ kristalının primitiv özəyinin quruluşu.

LDA yaxınlaşmasında HGH psevdopotensialları istifadə olunmaqla Quantum Wise–Atomistix Tool Kit və SGGA yaxınlaşmasında ultra-yumuşaq psevdopotensialları istifadə olunmaqla Quantum Espresso program təminatları ilə hesablamalardan əldə olunmuş zona quruluşuna əsasən $TlInS_2$ kristalının valent zonasının tavanı və keçiricilik zonasının dibi Brillüen zonasının Γ nöqtəsində yerləşir. Bu fakt kristalın fundamental udma kənarının düz keçidlərlə formalışmasını göstərir. Qadağan zolağın eninin 1.43eV olub təcrübi nəticələrlə ($2\text{--}2.4\text{eV}$ [11] müqayisədə kiçik alınması LDA və SGGA yaxınlaşmalarının məlum çatışmazlıqları ilə izah olunur. Lakin, qeyd etmək lazımdır ki, LDA və GGA yaxınlaşmaları, ümumiyyətlə, valent zonasının quruluşunu, həmçinin zonaların dispersiya qanuna uyğunluqlarını kifayət qədər yaxşı verir.

Cədvəl 1

$TlInS_2$ kristalında primitiv özəyə daxil olan atomların optimallaşdırılmış və eksperimentdən [10] məlum olan koordinatları.

Atom	x^{opt}	y^{opt}	z^{opt}	x^{exp}	y^{exp}	z^{exp}
Tl1	0.6655	0.7761	0.1127	0.6517	0.7253	0.1078
Tl2	0.3260	0.8366	0.6180	0.2776	0.845	0.6158
In1	0.5788	0.7837	0.8422	0.5861	0.7899	0.8378
In2	0.2189	0.9173	0.3452	0.21	0.9178	0.3391
S1	0.9297	0.9297	0.25	0.9295	0.9295	0.25
S2	0.4672	0.4672	0.25	0.4468	0.4468	0.25
S3	0.6416	0.1875	0.0538	0.6417	0.2323	0.0695
S4	0.4453	0.9292	0.2553	0.447	0.9294	0.2508
S5	0.7831	0.8563	0.5697	0.7665	0.8583	0.5732



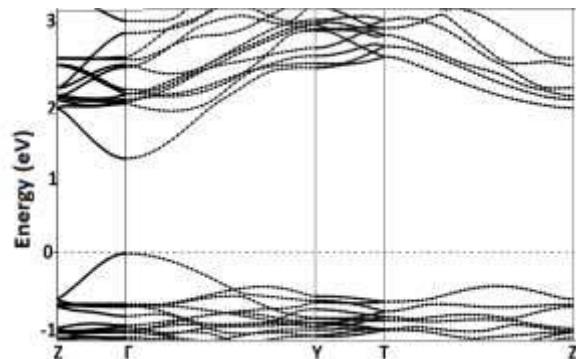
Şəkil 2

TlInS₂ kristalında HGH psevdopotensialı ilə hesablanmış hallar sixlığı (sol) və zona quruluşu (sağ)

aydın görünüyü kimi, valent zonalarını mənşə və dispersiya xüsusiyətlərinə görə 5 qrupa bölmək mümkündür. 1-ci qrup valent zonaları - valent zonasının ən yuxarı hissəsi olub ($0\div-4$)eV enerji intervalında yerləşir. Bu qrupa daxil olan zonalar əsasən S atomlarının 3p hallarından törəyir. Bunu yanaşı, qeyd etmək lazımdır ki, valent zonasının tavan hissəsinin formalamaşması həm də Tl atomlarının 6s elektronlarının iştirakı ilə baş verir. 1-ci qrup valent zonalarının mənşəyində Tl və In atomlarının p-elektronları da iştirak edirlər, lakin bu iştirak S-3p elektron halları ilə müqayisədə qat-qat zəifdir. 2-ci qrup valent zonaları bir qədər aşağıda 1-ci qrupdan zəif izolə olunmuş halda ($-4\div-7$)eV intervalında yerləşirlər, mənşə etibarı ilə Tl-6s və In-5s elektron hallarından törəyirlər. Daha aşağıda ($-11\div-15$)eV intervalda daha 3 qrup zonalar vardır. 3-cü qrup valent zonaları -11eV ətrafında yerləşirlər və Tl-5d elektron hallarından törəyirlər. S atomlarının 3s elektron hallarından törəyən 4-cü qrup valent zonaları ($-12\div-13$)eV intervalında yerləşirlər. 5-ci qrup valent zonaları ən aşağıda, -15eV ətrafında yerləşirlər və mənşəcə In-4d hallarından törəyirlər. Qeyd etmək lazımdır ki, zona quruluşu mənzərəsindən də görünüyü kimi, Tl-5d, In-4d mənşəli zonalar müstəvi formada olub dar enerji intervalında yerləşirlər, Fourier fəzəsində zəifcə dispersiya belə nümayiş etdirmirlər.

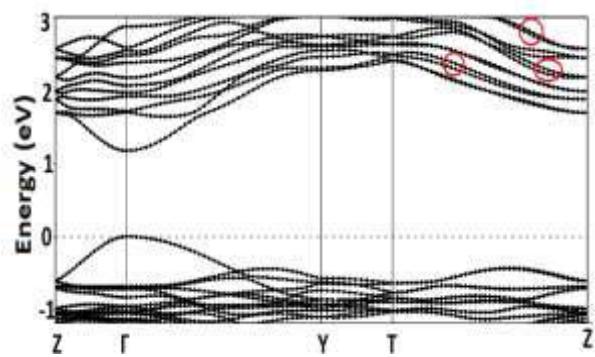
Zona quruluşundan görünüyü kimi keçiricilik zonalarının əsas hissəsi ($1\div10$)eV intervalında yerləşir. Hallar sixlığı mənzərəsinə əsasən,

keçiricilik zonasının dibi və ona yaxın hissələr əsasən In atomlarının 5s elektron hallarından yaranır.



Şəkil 3

TlInS₂ kristalının spin orbital qarşılıqlı təsiri nəzərə alınmamış hesablanmış zona quruluşu.



Şəkil 4

TlInS₂ kristalının spin orbital qarşılıqlı təsiri nəzərə alınmış hesablanmış zona quruluşu.

Yuxarı keçiricilik zonalarının formalamaşmasında Tl və In atomlarının müvafiq olaraq 6p- və

5p elektronları, qismən də S atomlarının 3p Formalaşmasında isə Tl-6s elektronları iştirak edirlər. Qeyd etmək lazımdır ki, Tl-5d, In-4d və S-3s elektronları, nə yuxarı (1-ci və 2-ci qrup) valent zonalarının, nə də keçiricilik zonalarının yaranmasında praktiki olaraq iştirak etmirler.

Quantum Espresso program təminatı ilə DFT-SGGA yaxınlaşmasında spin-orbital qarşılıqlı təsirinin nəzərə alınmaması və alınması ilə hesablanmış zona quruluşlarının qadağan zolaq ətrafindəki hissələri müvafiq olaraq Şəkil 3 və Şəkil 4-də verilmişdir. Müqayisələr göstərir ki, spin-orbital qarşılıqlı təsirin nəzərə alınması valent zonalarının quruluşunda nəzərə çarpan dəyişikliklərə gətirmir və ümumiyyətlə qadağan zolaq ətrafindəki hallara ciddi təsir göstərmir. Lakin keçiricilik zonasında bəzi zonaların dispersiyasında müəyyən dəyişikliklərin olması da qeyd olunmalıdır. T və Z nöqtələri istisna olunmaqla T-Z simmetriya xətti boyunca ikiqat cırlaşmalar aradan qalxır. Maksimal spin-orbital parçalanma ~0.3eV olub keçirici zonanın aşağı hissələrində müşahidə olunur. Yuxarıda qeyd olunduğu kimi keçiricili zonanın aşağı hissəsinin formalaşmasında əsasən ağır In atomlarının 5s və Tl atomlarının 6p halları iştirak edir, bu da öz növbəsində uyğun enerji zonalarında daha böyük parçalanmaların yaranmasına gətirib çıxarır.

NƏTİCƏ

Sixlıq Funksionalı Nəzəriyyəsi çərçivəsində müəyyən olunmuşdur ki, $TlInS_2$ kristalının valent

1. W.Henkel, H.Hochheimer, C.Carlone et. all. *High-pressure Raman study of the ternary chalcogenides $TlGaS_2$, $TlGaSe_2$, $TlInS_2$ and $TlInSe_2$* , *Phys. Rev.*, **26** (1982) 3211-3221.
2. N.Mamedov, Y.Shim, W.Okada, R.Tashiro, K.Wakita. *Band gap exciton in ferroelectric $TlInS_2$: Dimensionality and screening*, *Phys. Status Solidi*, **b** (2015) 1-6.
3. K.R.Allakhverdiyev, N.D.Akhmed-zade, T.G.Mamedov, T.S.Mamedov, Mir-Gasan Yu.Seidov. *Behavior of the layered crystals $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$ near phase transitions in a static electric field*, *Low temperature physics*, **6** (2000) 56-61.
4. P.Hohenberg, W.Khon. *Inhomogeneous electron gas*. *Phys. Rev.*, **B 136** (1964) B864-B871.

elektronları, daha yuxarı zonaların zonasının tavarı və keçiricilik zonasının dibi Brillüen zonasının Γ nöqtəsində yerləşir. Bu fakt kristalın fundamental udma kənarının düz keçidlərlə formalaşmasını göstərir. Qadağan zolağın eni 1.45eV. Elektron spekrində valent zonaların mənşə və dispersiya xüsusiyyətlərinə görə onları beş qrupa bölmək mümkündür. (0÷-4)eV intervalda yerləşən ən yuxarı qrup valent zonaları S atomlarının 3p hallarından törəyir. (-4÷-7)eV-da yerləşən valent zonaları mənşə etibarilə Tl atomlarının 6s və In atomlarının 5s hallarından formalaşırlar.

-11eV ətrafindəki valent zonalarının formalaşmasında S atomlarının 3s halları, (-12÷-13)eV-dəki zonaların formalaşmasında Tl atomunun 6p halları, -15eV ətrafindəki zonaların formalaşmasında isə In atomlarının 5s halları iştirak edirlər. In atomlarının 5s halları keçiricilik zonasının dibini və ona yaxın hissələri formalaşdırır. Yuxarı hissələrin formalaşmasında Tl və In atomlarının uyğun olaraq 6p və 5p elektronları qismən isə S atomunun 3p elektronları iştirak edirlər. Tədqiqat zamanı həmçinin müəyyən edilmişdir ki, spin-orbital qarşılıqlı təsirin nəzərə alınması valent zonalarının quruluşunda nəzərə çarpan dəyişikliklərə gətirmir və ümumiyyətlə qadağan zolaq ətrafindəki hallara ciddi təsir göstərmir. Parçalanmalar T və Z nöqtələri istisna olunmaqla T-Z simmetriya xətti üzrə müşahidə olunur. Maksimal parçalanmalar ~0.3eV təşkil edir.

5. W.Kohn, L.Sham. *Self-consistent equations including exchange and corelation Effects*, *Phys. Rev.*, **140** (1965) A1133–A1138.
6. <http://quantumwise.com/>
7. J.Perdew Burk, K.Y.Wang. *Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system*, *Phys. Rev.*, **B 54** (1996) 16533-16539.
8. <http://quantum-espresso.org/>
9. K.R.Allakhverdiev, F.M.Hashimzade, D.A.Huseinova, M.A.Nizametdinova, G.S.Orudzhev et. all. *Lattice dynamics of ferroelectric $TlInS_2$ crystal*, *Canadian Journal of Physics*, **90** (2012) 407–412.
10. M.A.Nizametdinova, F.M.Hashimzade, D.A.Huseinova, G.S.Orudzhev, K.R.Allakhverdiyev. *Lattice dynamics of the ternary-layered $TlGaSe_2$ compound*, *Moldavian Journal of the Physical Sciences*, **9** (2010) 350-354.

11. M.M.El-Nahass, M.M.Sallam. *Optical and photo-electric properties of TlInS₂ layered Single crystals*, *Egypt. J. Solids*, **31** (2008) 31-44.

ELECTRON SPECTRUM AND DOS CALCULATIONS FOR TlInS₂ CRYSTAL FROM FIRST PRINCIPLES

N.A.ISMAYILOVA, G.S.ORUDZHEV

The results of electron spectrum and DOS calculations for TlInS₂ crystal from the first principle in the framework of Density Functional Theory have been presented. The electron spectrum of TlInS₂ by Quantum Wise and Quantum Espresso software program packages, with LDA and SGGA approximations respectively have been investigated. The origin of electron bands from s, p, d electron states of S, In, Tl atoms have been defined. Have been established that the 1-st group of valence band in energy region (0÷-4)eV originate from 3p states of S atoms . The 2-nd group of valence band (-4÷-7)eV in its origin has obliged to 6s states of Tl atoms and 5s state of In atoms. 3-th group of valence bands about -1eV origin from 5d- elektron states of Tl atoms. 3s electron state of S atoms originate 4-th group of valence bands(-12÷-13)eV. The next 5-th group of valence band about -15eV have taken their origin from 5d- states of In atoms. The bottom of conduction band mainly has originated from 5s states of In atoms. Both bottom of conduction band and top of the valence band have located in the center of Brullouin zone and in its origin obliged mainly to 5s states of In atoms and 6s state of Tl atoms, respectively. The bottom of the conduction band and top of the valence band located in the center of the Brillouin zone and origin basically from 5s of In atoms and 6s of Tl, respectively. It has been also found that the inclusion of spin-orbit interaction has not been essential for the energy states near the gap and remove the band degeneracy on the symmetry line TZ, but has not removed the degeneracy in points T, Z and Γ, Y. Maximum spin-orbit splitting of bands was ~ 0.3eV.

РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА И ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ КРИСТАЛЛА TlInS₂

Н.А.ИСМАЙЛОВА, Г.С.ОРУДЖЕВ

Представлены результаты расчетов из первых принципов в рамках теории функционала плотности электронного спектра кристалла TlInS₂. Электронная структура кристалла была изучена с использованием пакета программ Quantum Wise и Quantum Espresso соответственно в LDA и SGGA приближениях. Исследованы происхождения зон из s-, p-, d-электронных состояний атомов Tl, In, S. Было установлено, что 1-я группа валентных зон в области (0÷-4)eV образована из 3p электронных состояний атомов S. 2-я группа валентных зон в (-4÷-7)eV своим происхождением обязана 6s состояниям атомов Tl и 5s состояниям In. 3-я группа валентных зон, узко расположенных в -11eV, образована из 5d состояний атомов Tl. 3s состояния атомов S образовывает 4-ю группу валентных зон в (-12÷-13)eV. И последняя 5-я группа валентных зон в -15eV берет свое происхождение из 4d состояний атомов In. Дно зону проводимости и потолок валентной зоны расположены в центре зоны Бриллюэна и своим происхождением обязаны, в основном, 5s состоянию атомов In и 6s состоянию Tl, соответственно. Было также установлено, что учет спин-орбитального взаимодействия не существенен для энергетических состояний вблизи запрещенной зоны, снимает вырождения зон по линии симметрии T-Z, но не снимает вырождения в самих точках T, Z, а также Γ, Y. Максимальное спин-орбитальное расщепление зон составляет ~0.3eV.

Редактор: д. н. по физике З.Джахангирли

PACS 88.40.H

SILICON PLASMON SOLAR CELLS WITH SILVER NANOPARTICLES

T.D.DZHAFAROV^{1,2}, A.M.PASHAEV², B.G.TAGIEV^{1,2}, S.S.ASLANOV¹,
S.H.RAGIMOV¹, A.A.ALIEV²

Institute of Physics, Azerbaijan National Academy of Sciences¹

AZ 1143, Baku, G. Javid ave., 131

National Aviation Academy of Azerbaijan Airlines²

AZ1045, Baku, Bina 25-km

caferov@physics.ab.az

Received: 15.05.2015

Accepted: 22.06.2015

ABSTRACT

Influence of Ag nanoparticles on optical and photovoltaic properties of glass, silicon substrates and silicon solar cells has been investigated. Silver nanoparticles have been fabricated by evaporation of thin Ag layers followed by the thermal annealing. The surface plasmon resonance peak was observed in the absorbance spectrum at 470 nm of glass with deposited silver nanoparticles. It is demonstrated that deposition of silver nanoparticles on silicon substrates was accompanied with a significant decrease in reflectance at the wavelength 360 – 1100 nm and increase of the absorption at wavelengths close to the band gap for Si substrates. We studied influence of Ag nanoparticles on photovoltaic characteristics of silicon solar cells without and with common use antireflection coating (ARC). It is demonstrated that silver nanoparticles deposited onto the front surface of the solar cells without ARC led to increase in the photocurrent density by 21% comparing to cells without Ag nanoparticles. Contrary to this, solar cells with Ag nanoparticles deposited on front surface with ARC discovered decrease in photocurrent density. The improved performance of investigated cells was attributed to Ag-plasmonic excitations that reduce the reflectance from the silicon surface and ultimately leads to the enhanced light absorption in the cell. This study showed possibility of application of Ag nanoparticles for the improvement of the conversion efficiency of wafer-based silicon solar cells instead of usual ARC.

Keywords: silver nanoparticles, plasmonic resonans, reflectance, silicon solar cells, efficiency

INTRODUCTION

Silicon is most widely material used on photovoltaic energetic due to raw material abundance in nature, stability of the parameters and well established processing technologies. However for large-scale applications manufacturing cost must be reduced significantly. Simultaneous increase of efficiency and considerable reduction the cost of manufacturing are required for making photovol-

taic sources of electricity competitive with other technologies. The main problem for solar cell is relatively low efficient of absorption of solar light. Plasmon resonance can either efficiently scatter incident light increasing the optical path length in cell and/or can cause the near-field plasmonic absorption. In the end, both effects can result in the additional light absorption and finally can improve the efficiency of cell.

The method of trap the light by nanoparticles deposited on the top of cell or embedded in the cell structure have been suggested [1-3]. Incident light excites the localized surface plasmons in nanoparticles. Plasmon resonance can cause either efficiently scatter incident light increasing the optical path length in cell and/or can cause the near-field plasmonic absorption. The contribution of each mechanism depends on size, shape, spacing of the metallic particles and the dielectric properties of the surround medium. Metallic nanoparticles that responsible for surface plasmons have been shown to be able to provide advanced light trapping to significantly enhance the light absorption in solar cells due to the scattering and near-field effects. Overwhelming majority of works on plasmonic solar cells was devoted to using silver nanoparticles on thin-film amorphous silicon solar cells. Winans et al. [4] have investigated effect of silver nanoparticles on the front, the back and both of thin a-Si:H solar cells and showed most increase in efficiency when silver nanoparticles were on both the front and back, that have been attributed the increased scattering. These researches demonstrated also the increased cell efficiency for larger silver particle sizes. Derkacs et al. [5] achieved 8% overall increase in efficiency for thin-film amorphous silicon solar cells with gold nanoparticles. The conversion efficiency of amorphous silicon solar cells with Ag-embedded nanoparticles increased from 6.2% to 7.0% related with the scattering effect [5]. Chen et el. [7] using incorporated 200nm silver nanoparticles in amorphous silicon cells to enhanced light absorption in a broadband wavelength range achieved efficiency of 8.1%. Increase of photocurrent of amorphous silicon solar cells embedded with a diameter of 180nm Ag nanoparticles using the selective aerosol deposition technique was observed by Santbergen et al. [8]. Embedding of the larger silver nanoparticles on the front, inside or at the rear of the a-Si:H solar cells leads to the external quantum efficiency increased for wavelength longer 600nm [9].

The effect of metal nanoparticles on optical properties and performance of c-Si (wafer-based) solar cells as compared with thin amorphous silicon solar cells have been rare considered. The en-

hancement of photocurrent of thin-film and wafer-based silicon solar cells with silver nanoparticles was observed by Pillai et al. [3]. Thouti et el. [10] have reported considerable reflectance reduction from c-silicon substrate after thermal evaporation of thin silver film (about 4nm) and thermal annealing at 300°C. The reflectance decrease in the UV-Vis-NIR regions of the spectrum (350÷1300nm) is very sensitive to the size and shape of particles and it is attributed to the surface plasmons of silver particles. Silver nanoparticles deposited on silicon solar cells by evaporation of thin Ag film (10 nm) followed by thermal annealing result in improve and deteriorate reflectance and spectral response of the cell depending on wavelength [11]. Enhancement in photocurrent and efficiency by about 32% of c-Si solar cells with nanoparticles of indium on the front surface and silver particles on the rare surface have been attributed to the plasmonic scattering by In and Ag nanoparticles [12]. Yun et el. [13] have reported enhancement of the quantum efficiency by about 10÷15% for ZnO/n-Si solar cells with silver nanoparticles embedded in ZnO film. Increase of the external quantum efficiency have been observed for silicon solar cells with silver nanoparticles deposited on silicon surface by chemical dissolving the AgNO₃ solution [14]. It is seen from above, the influence of silver nanoparticles on optical properties and photovoltaic parameters of c-Si solar cells is weakly studied.

This study reports reflectance and absorption properties silicon substrate, and photovoltaic parameters of silicon solar cells with silver nanoparticles (of relatively larger sizes) deposited on surface of silicon with and without antireflection coating (ARC) and influence of interaction of silver particles with ARC on characteristics of silicon solar cells.

EXPERIMENTAL PROCEDURE

Monocrystalline p-type boron-doped silicon wafers with orientation of (100), resistivity about of 3Ωcm and thickness of about 200μm were used for fabrication of solar cells by screen printed process [15-17]. The wafers were cleaned in NaOH:H₂O (1:4 in volume) at 80°C for 10 min, in HCl at room temperature for 10min and then etched in HF: H₂O (1:1 in volume) for 1 min.

Then samples were dried in deionized (DI) water. Containing phosphorus spin-on dopant (SOD) (KFK-50-10T type) was used as phosphor source. Cleaned surface of wafer was coated with SOD by spin-on technique at room temperature with 2000 rpm for 10 seconds. Then the coated samples were baked at 600°C for 2 min for destructization of the coating.

The n⁺-p junction was formed by phosphorus diffusion from SOD into p-type silicon substrate at 950°C in vacuum 1.33×10^{-1} Pa for 25 min in a tube furnace. The phosphor-silicate glass layer was removed from the silicon surface with hydrofluoric acid solution (HF: H₂O, 1:9). n⁺-emitter layer with 0.5÷1.0μm thickness and 15÷20Ω/□ sheet resistance was formed as a result of phosphorus diffusion. The electrical contacts were made by screen printed process with a Du Pont photo voltaic silver paste for front and silver with 3% aluminum paste for the back contact. Samples with silver contacts were baked at 200°C for 10 min and then metallization at 800°C for 10 min in the conventional annealing furnace was done. Two types of solar cells were prepared in this work: without and with traditional SiO_x antireflection coating (ARC) (A-type and B-type cells respectively).

Silver nanoparticles have been fabricated on top surfaces of silicon solar cells (of both A and B types), silicon substrates wafers and cleaned glass substrates by thermal evaporation of 10÷15nm Ag films followed by thermal annealing. Silver evaporation has been performed in vacuum of 1.3×10^{-3} Pa at room temperature. The thickness of the Ag film was measured during evaporation by using a Deposition controller (Inficon, Leybold). The solar cells, silicon wafers and glass substrates with silver films and the test samples without silver films were then annealed at nitrogen atmosphere in furnace at 500°C. It will be noted that best adhesion of silver nanoparticles to silicon surface was observed as result of thermal treatment at 500°C for 10-30 min. To investigate the surface morphology, the optical properties of silicon wafers and photovoltaic characteristics of the solar cells, we examined the size and density of the Ag nanoparticles by the atom-force microscopy (AFM, Solver NEXT, NT-MDT), the integrated reflectance and

transmittance of the silicon wafers or glass substrates and the current-voltage (I – V) characteristics of the cells in each stage of processing. The silver nanoparticles have a surface coverage about 35-40%. The integrated reflectance and transmittance of the samples was measured at room temperature by UV-VI spectrometer (“Specord-210”) in the wavelength range 300÷1100nm. The absorption spectra of samples were found from the reflectance and transmittance data of the samples. The photovoltaic parameters of the cells without and with Ag nanoparticles, and also with both ARC and Ag-nanoparticles coverage were determined from current-voltage measurements under illumination (AM 1.5) using Solar Analyzer (“Prova200”) [17].

RESULTS AND DISCUSSION

Fig. 1 presents AFM image from Ag nanoparticles on silicon substrate formed by thermal annealing of silver film (thickness of 12nm). This sample exhibits Ag particles with average radii about 60-80 nm and density of $2 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$. The transformation mechanism of the silver film on substrate (silicon, glass etc.) to silver nanoparticles as result of the thermal treatment can be presented as follows. At first, the silver thin film breaks on small pieces during the thermal annealing due to difference in the thermal expansion coefficients of film and substrate. Then silver atoms located along the edges of pieces begin diffuse preferentially along the surface substrate and precipitate on defects, hollows and ledges of the surface relief. Finally, silver atoms coalescence in nanoparticles as formation of silver nuclei is thermodynamically favorably on defect positions where theirs the free energy smaller than that on flat surface.

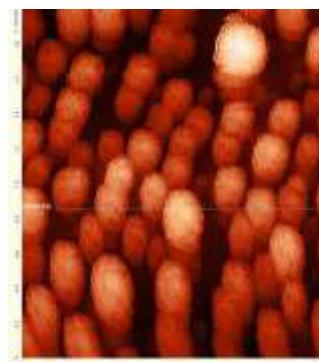


Fig.1
AFM image of the Ag nanoparticles on silicon surface.

The reflectance spectra for silicon surface without and with Ag nanoparticles are given in Fig. 2. Both samples have been annealed at the same conditions. Comparison of reflectance for silicon surface with Ag nanoparticles with “clear” silicon surface shows reduction average surface reflectance by about 17.3% in the region from 600 to 1100nm.

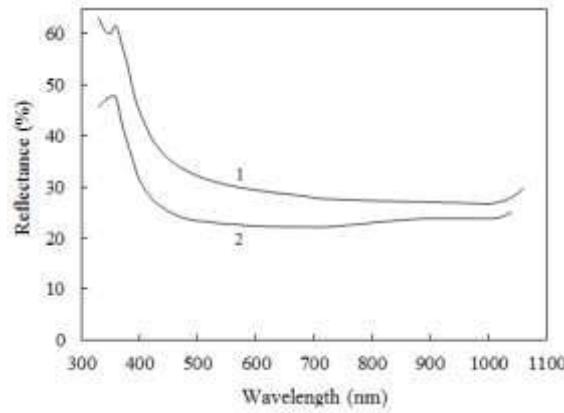


Fig.2

The reflectance spectra of silicon surface without (1) and with Ag nanoparticles (2).

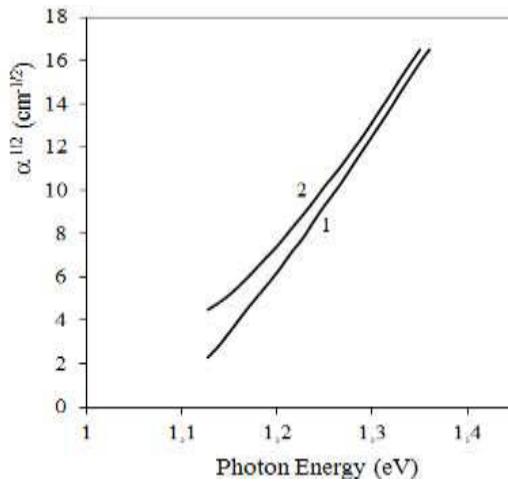


Fig.3

The absorption spectra of silicon surface without (1) and with Ag nanoparticles (2).

The absorption spectra for the silicon without and with silver nanoparticles samples are presented in Fig. 3. It is seen that the absorption spectrum for silicon without Ag nanoparticles is described by well-known absorption coefficient-photon energy ($\alpha^{\nu/2}-hv$) relation with indirect forbidden band gap $E_g=1.08\text{eV}$ for silicon at room

temperature. At the same time the absorption spectrum for Si with silver nanoparticles some deviates from this relation and values for absorption coefficient are larger (on average by 34%) than those for silicon all over investigated spectral region from 1.12 to 1.35eV. Account must be taken of resonance frequency of silver nanoparticles (400÷600nm in dependency on particle size) is located in intrinsic absorption region of Si and therefore it is difficult to observe silver-stimulated plasmon effect in transmittance spectrum of Si with silver particles. Therefore we investigated the absorbance spectrum of silver nanoparticles on glass substrate obtained as result of the silver-coated glass annealed at 500°C for 10min (Fig. 4). The absorbance curve of silver nanoparticles with the average radii about 80nm on glass substrate determined from AFM measurements exhibits peak at 470nm that can be caused by localized plasmons on the Ag-particle surface [1]. Moreover, deposition of Ag nanoparticles on silicon surface leads to absorption enhancement and reduction of the surface reflectance.

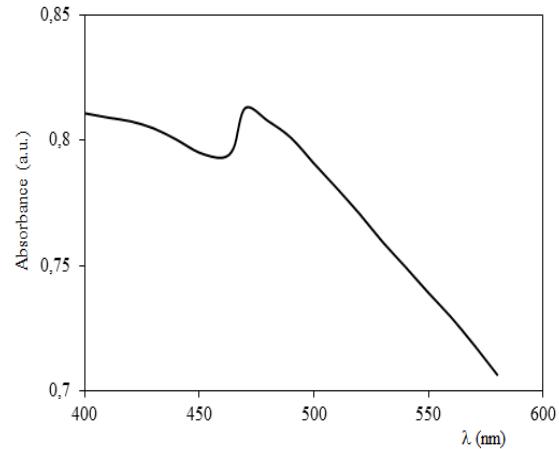


Fig.4

The absorbance spectrum of the Ag nanoparticles on glass substrate.

The typical current-voltage characteristics of Si solar cells without traditional ARC (A-type cells) are presented in Fig. 5. The best improvement of photovoltaic characteristics is observed for Si solar cells covered with silver nanoparticles. Parameters of A-type solar cells are given in Table1. Some enhancement the efficiency of thermal

treated cells (without Ag film) compared to the primary cells can be attributed to partial redistribution of uncontrolled impurities from p-n junction region.

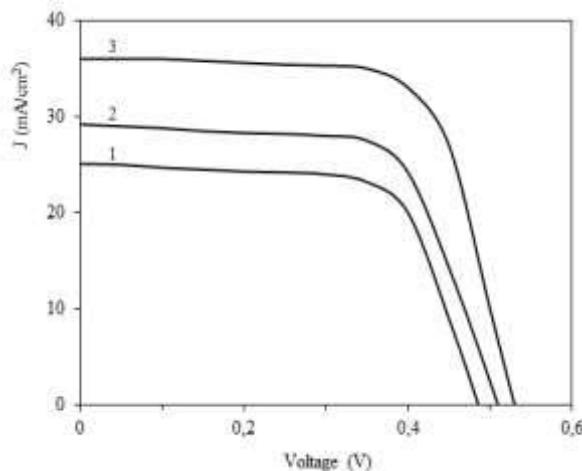


Fig.5

Photocurrent density-voltage characteristics of silicon solar cells without ARC (A-type cells): the untreated cell (1) and thermal treated cells without (2) and with Ag nanoparticles (3).

Table 1

The photovoltaic characteristics of Si solar cells without ARC (A-type cells)

Parameters of cell	Primary cell	Thermal treated cell	Ag-thermal treated cell
J_{sc} (mA/cm ²)	25.1	29.2	36.0
V_{oc} (V)	0.486	0.510	0.530
η (%)	8.17	9.52	13.20

As stated above the collective oscillations of electrons in metal nanoparticles excited by incident light lead formation of polarization charges on the particle surface i.e. origin the localized surface plasmons. Plasmonic effect consists in trapping of the incident light by plasmons due to either due to absorption and (or) scattering depending upon the nanoparticle size. The absorption by plasmons dominates for metallic particles with size much smaller than the Plasmon wavelength of light. However, as the particle size increases, plasmonic scattering prevails for light wavelength around the plasmonic resonance [3]. The angular spread of light is accompanied by enhancement in path length in silicon substrate and thereby in-

creased absorption and generation of electron-hole pairs. Finally, both processes must lead to enhanced absorption of light in substrate. Observed on Fig.4 and Fig. 5 the reduced reflectance from silicon substrate and the enhanced absorption of light in substrate ultimately lead to the performance improvement of silicon solar cells with silver nanoparticles.

The complementary effect was observed for the cells with Ag nanoparticles deposited on silicon cell surface with the traditional ARC (B-type cells) (Fig 6).

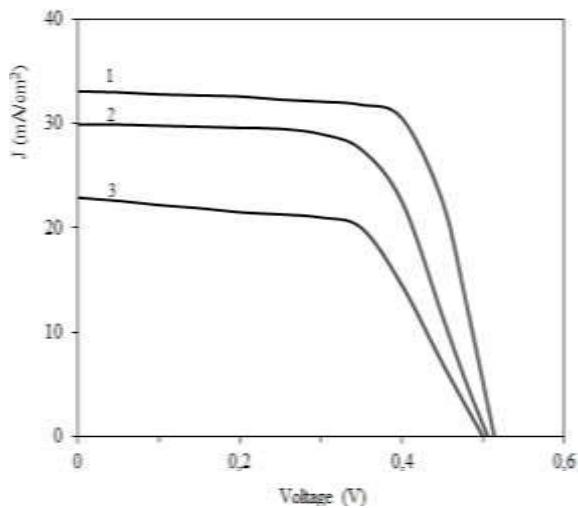


Fig.6

Photocurrent density-voltage characteristics of silicon solar cells without ARC (B-type cells): the untreated cell (1) and thermal treated cells without (2) and with Ag nanoparticles (3).

The photovoltaic characteristics of cells with Ag-nanoparticles is worse than those for both primary cells and thermal treated cells (without Ag film) (Table 2).

Table 2
The photovoltaic characteristics of Si solar cells with ARC (B-type cells)

Parameters of cell	Primary cell	Thermal treated cell	Ag-thermal treated cell
J_{sc} (mA/cm ²)	33.1	29.9	22.9
V_{oc} (V)	0.514	0.506	0.507
η (%)	12.20	9.63	7.06

This effect can be caused by Fano interference [18-20]. Oxidation of silver film deposited on

ARC (SiO_x) during the thermal annealing can be other reason for lower photovoltaic parameters of Ag-nanoparticles coated solar cells. The experiments on the influence of the size, shape and density distribution of silver nanoparticles on the photovoltaic parameters of silicon solar cell are being carried.

CONCLUSIONS

It is demonstrated that deposition of the silver nanoparticles on surfaces on silicon substrates decreases the reflection about of 17.3% in the wavelength interval of 600 – 1100 nm and increases the absorption about of 34 % in the wavelength ranger of 900 – 1100 nm. Silicon solar cells with the silver nanoparticles on front side (without

the standard ARC) showed enhancement in efficiency of 21 % compared to the silicon cells without Ag nanoparticles. This enhancement is attributed to mainly light scattering effect of silver nanoparticles. Nanoparticles deposited on front surface of silicon solar cells increasing the performance of the cells due to surface plasmonic effect play role of antireflection coating. Simplicity and variety of physical and chemical technologies formation of nanoparticles is advantage as compared with the traditional ARC deposition methods. The deterioration of the photovoltaic parameters of silicon solar cells with silver nanoparticles deposited on ARC-containing surface was observed. Nature of this effect must be investigated later on.

1. K.R.Catchpole, A.Polman. *Plasmonic solar cells, Optics Express*, **16** (2008) 21793-21800.
2. H.Atwater, A.Polman. *Plasmonics for improved photovoltaic devices, Nature Material*, **9** (2010) 205-213.
3. S.Pillai, K.R.Catchpole, T.Trupke, M.A.Green. *Surface plasmon enhanced silicon solar cells, J. Appl. Phys.*, **101** (2007) 093105.
4. J.D.Winans, C.Hungerford, K.Shome, L.J.Rothberg, P.M.Fauchet. *Plasmonic effects in ultrathin amorphous silicon solar cells: performance improvements with Ag nanoparticles on the front, the back, and both, Optics Express*, **23** (3) (2015) A92-A105.
5. D.Derkacs, S.H.Lim, P.Matheu, W.Mar, E.T.Yu. *Improved performance of amorphous silicon solar cells via scattering from surface plasmon polaritons in nearby metallic nanoparticles, Appl. Phys. Lett.*, **89** (2006) 093103.
6. J.Jung, K.Ha, J.Cho, S.Ahn, H.Park, S.Q.Hussain, S.Q.Chi, J.Yi. *Enhancing light trapping of thin film solar cells by plasmonic effect of silver, J. Nanosci. Nanotechnol.*, **13** (2013) 7860-7864.
7. X.Chen, B.Jia, J.K.Saha, B.Cai, N.Stokes, Q.Qiao, Y.Wang, Z.Shi, M.Gu. *Broad enhancement in thin-film amorphous silicon solar cells enabled by nucleated silver nanoparticles, Nano Lett.*, **12** (2012) 2187-2192.
8. R.Santbergen, H.Tan, T.Pfeiffer, X.Li, T.Frijnts, A.Smets, A.Schmidt-Ott, M.Zeman. *Plasmonic solar cells with embedded silver nanoparticles from vapor condensation, Proc. MRS Fall Meeting*, **1391** (2012) 2011.
9. R.Lang, M.Zeman. *a-Si:H solar cells with embedded silver nanoparticles, Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)*, 20-25 June 2010, 35th IEEE, 748-753.
10. E.Thouti, N.Chander, V.Dutta, V.K.Komarala. *Optical properties of Ag nanoparticles layers deposited on silicon substrates, Journal of Optics*, **15** (3) (2013).
11. T.L.Temple, G.D.K.Mahanama, H.S.Reeha, D.M.Bagnall. *Influence of localized surface plasmon excitation in silver nanoparticles on the performance of silicon solar cells, Solar Energy Materials and Solar Cells*, **93** (2009) 1978-1985.
12. W.Ho, Y.Lee, S.Su. *External quantum efficiency response of thin silicon solar cell based on plasmonic scattering of indium and silver nanoparticles, Nanoscale Research Letters*, **9** (2014) 483.
13. J.Yun, J.Kim, Kojori, H.S.Tong, W.A.Anderson. *Current enhancement of aluminum doped ZnO/n-Si isotype heterojunction solar cells by embedding silver nanoparticle, J. Nanosci. Nanotechnol.*, **13** (2013) 5547-5551.
14. S.Maity, S.Roy, A.Kumar. *Silver nanoparticles to enhance the efficiency of silicon solar cell, Intern. J. Engineering Science Invention*, **2** (7) (2013) 101-104.
15. M.A.Green. *Thin film solar cells: review of materials, technologies and commercial status, J. Mater. Sci: Mater. Electron.*, **18** (10) (2007) S15-S19.
16. O.P.Agnihotri, B.K.Gupta. *Solar Selective Surfaces*, John Wiley, New York, (1981).
17. T.D.Dzhafarov, S.S.Aslanov, S.H.Ragimov, M.S.Sadigov, S.AydinYuksel. *Effect of nanop-*

- rous silicon coating on silicon solar cell performance, Vacuum, **86** (2012) 1875-1879.*
18. U.Fano. *Effect of configuration interaction on intensities and phase shifts, Phys. Rev., **124** (1961) 1866-1878.*
19. V.Giannini, Y.Francescato, H.Amrani, C.C.Philips, S.A.Maier. *Fano resonances in nanoscale plasmonic systems: a parameter-free modeling approach, Nano Lett., **11** (2011) 2835-2840.*
20. F.Cortes-Juan, C.Chaverri Ramos, J.P.Connoly, C.David, F.J.Garcia de Abajo, J.Hurtado, V.D.Mihalefchi, S.Ponce-Alcantara, G.Sanches. *Effect of Ag nanoparticles integrated within anti-reflection coatings for solar cells, Journal of Renewable and Sustainable Energy, **5** (3) (2013) 033116.*

GÜMÜŞ NANO-ZƏRRƏCİKLƏRLİ PLAZMON SİLİSİUM GÜNƏŞ ELEMENTLƏRİ

T.C.CƏFƏROV, A.M.PAŞAYEV, B.H.TAĞIYEV, Ş.S.ASLANOV, Ş.X.RƏHİMÖV, Ə.Ə.ƏLİYEV

İşin məqsədi, səthinə gümüş nano-zərrəciklər çökdürülmüş silisium günəş elementlərinin texnologiyasının işlənməsi, gümüş nano-zərrəciklərlə silisium səthin morfoloziyasının və optik xassələrinin öyrənilməsi, gümüş nano-zərrəciklərinin silisium günəş elementlərinin fotovoltaik xarakteristiklərinə təsirinin araşdırılmasıdır. Gümüş nano-zərrəciklərinin səth bölgəsində lokallaşmış plazmonlarının yaradılması ilə əlaqəli günəş şualarının silisumda udulmasının artması və nəticədə günəş elementləmin effektivliyinin təxminən 21% böyüməsi göstərilmişdir.

ПЛАЗМОННЫЕ КРЕМНИЕВЫЕ СОЛНЕЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ С СЕРЕБРЯНЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ

Т.Д.ДЖАФАРОВ, А.М.ПАШАЕВ, Б.Г.ТАГИЕВ, Ш.С.АСЛАНОВ, Ш.Х.РАГИМОВ, А.А.АЛИЕВ

Целью настоящей работы является создание кремниевых солнечных элементов с покрытием из серебряных наночастиц, изучение морфологии и оптических свойств кремния с наночастицами и определение влияния серебряных наночастиц на фотовольтаические характеристики кремниевых солнечных элементов. Показано, что нанесение Ag наночастиц на поверхность кремниевых солнечных элементов, в конечном итоге, увеличивает поглощение солнечного излучения благодаря возникновению локализованных поверхностных плазмонов в наночастицах и увеличивает эффективность преобразования на 21%.

УДК: 621.315.592

ATOMIC RADIAL DISTRIBUTION FUNCTIONS OF $\text{Ge}_x\text{As}_y\text{Se}_{(1-x-y)}$ GLASSES

S.I.MEHDIYEVA, E.A.MAMMADOV, A.E.MAMMADOVA*

*Institute of Physics, National Academy of Sciences,
AZ 1143, Baku, G.Javid Ave., 131
Baku European Lyceum*
AZ100, Baku, Rostropovich Street, 121
msalima@lan.ab.az*

Received: 04.09.2015

Accepted: 21.09.2015

Keywords chalcogenide glasses, radial distribution function.

Abstract

XRD powder patterns of $\text{Ge}_x\text{As}_y\text{Se}_{(1-x-y)}$ glasses are analyzed to calculate atomic radial distribution functions (RDF). Radii of the first and second coordination spheres of an arbitrary atom are determined from RDFs. The area under the first coordination peak has been calculated from structural model assumptions and compared to that found from RDF peak fit. The results support the structural model for Ge-As-Se with preference of heteropolar bondings and “8-N” coordinations of the constituent atoms.

INTRODUCTION

Glasses of the Ge-As-Se system are of interest for many important applications including phase-change memory devices, waveguides, optoelectronic media, etc [1]. However, the process of improvement of their device parameters is hindered due to lack of understanding of the local structure of these materials. The local structure of the glasses is characterized with absence of long-range atomic order and as compared with binary systems is further complicated with addition of compositional disorder [2]. The local structure of chalcogenide glasses is often described using the “8-N” rule when coordination of atoms is determined by number of covalent bonds formed to maintain a closed shell of eight electrons with N being the corresponding group number of each atom [3]. While the “8-N” rule can be readily addressed to constituent binary systems As-Se and Ge-Se, consideration becomes more complicated for the ternaries. Glassy compositions of binary systems in many cases preserve the short-range structure (i.e. structural units) of their crystalline counterparts. The Ge-As-Se system is a good glass-former that makes it difficult to obtain

crystalline phases and no or little information is available on crystalline phases of the system [4].

Atomic radial distribution function (RDF) calculated on the base of XRD powder pattern provides the nearest interatomic distances, which determines the coordination spheres, r , and number of nearest-neighbors surrounding an initial atom that is the coordination number.

This work is a continuation of previous studies and present some results of atomic radial distribution calculations for $\text{Ge}_x\text{As}_y\text{Se}_{(1-x-y)}$ glasses.

EXPERİMENTAL AND ANALYSIS DETAILS

XRD powder patterns for glasses with compositions $\text{Ge}_{0.05}\text{As}_{0.1}\text{Se}_{0.85}$, $\text{Ge}_{0.1}\text{As}_{0.1}\text{Se}_{0.75}$, $\text{Ge}_{0.18}\text{As}_{0.18}\text{Se}_{0.64}$, $\text{Ge}_{0.22}\text{As}_{0.22}\text{Se}_{0.56}$, and $\text{Ge}_{0.33}\text{As}_{0.12}\text{Se}_{0.55}$ have been analyzed. The details of sample preparation and experiments have been presented elsewhere [5].

The distribution of atoms about an average atom in polyatomic amorphous materials can be described by means of the coherent scattered intensity through usual Fourier integration [6]:

$$\begin{aligned}
g(r) &\equiv 4\pi R^2 \sum_i \sum_j x_i K_i K_j \rho_{ij}(R) = \\
&= 4\pi R^2 \left(\sum_j x_j K_j \right)^2 \rho_0 + \\
&+ \frac{2R}{\pi} \alpha \sum_j K_j^2 \int_0^{s_{max}} S[a(S) - 1] \sin SR dS
\end{aligned} \quad (1)$$

where ρ_{ij} represents atomic pair correlation function, $S = 4\pi \sin\left(\frac{\theta}{\lambda}\right)$, θ is the scattering angle, λ is wavelength of the incident beam, x_i is the atomic fraction of species i , ρ_0 is an average atomic density, K_i, K_j – effective electron numbers of atoms, α is a correction factor and $a(S)$ is a structure factor. The coherent intensity used in calculations was obtained from the experimental intensity, after background and polarization corrections, by normalizing at high S to $\langle f^2 \rangle + I_{ic}$, where f is the complex scattering amplitude of an atom and I_{ic} is the incoherent scattering.

RESULTS AND DISCUSSION

Bondings in Ge-As-Se glasses are formed with preference of heteropolar Ge–Se and As–Se bonds [2]. To satisfy all their bonding requirements four-fold coordinated Ge and three-fold coordinated As atoms form tetrahedral and pyramidal structural units, respectively, cross-linking Se-chains [7]. The coordination of each element corresponds to eight minus its group number in the periodic table of elements, while the average coordination number for the entire glass is expressed as [8]:

$$\bar{r} = r_A x + r_B y + r_C (1 - x - y) \quad (2)$$

where A, B, and C are the constituent elements, respectively. Average coordination numbers calculated from Eq. (2) for the glasses studied are then 2.2, 2.4, 2.54, 2.67 and 2.78 from the lowest to highest germanium concentration, respectively.

Radial distribution functions for the glasses calculated using Eq. (1) are presented in Fig. 1. Two peaks corresponding to first and second coordination spheres can be clearly identified. The RDF gives the number of atoms in a spherical shell of thickness dr at a distance r from an atom placed at origin. For a “perfectly” disordered amorphous material (or liquid) it is expected to rise monotonically with r . However, due to presence

of local orders in the structure, peaks are observed at positions corresponding to interatomic distances. In contrast to a simple system containing only one type of atoms, the RDF analysis and its interpretation are more complicated for multi-component disordered systems. In the ternary Ge-As-Se system the problem is further aggravated by fact that atoms are practically indistinguishable for X-rays, hence it is impossible to determine an atom with respect to which the distribution is taken. However, some conclusions can be drawn based on chemically ordered network (CON) [9] model considerations.

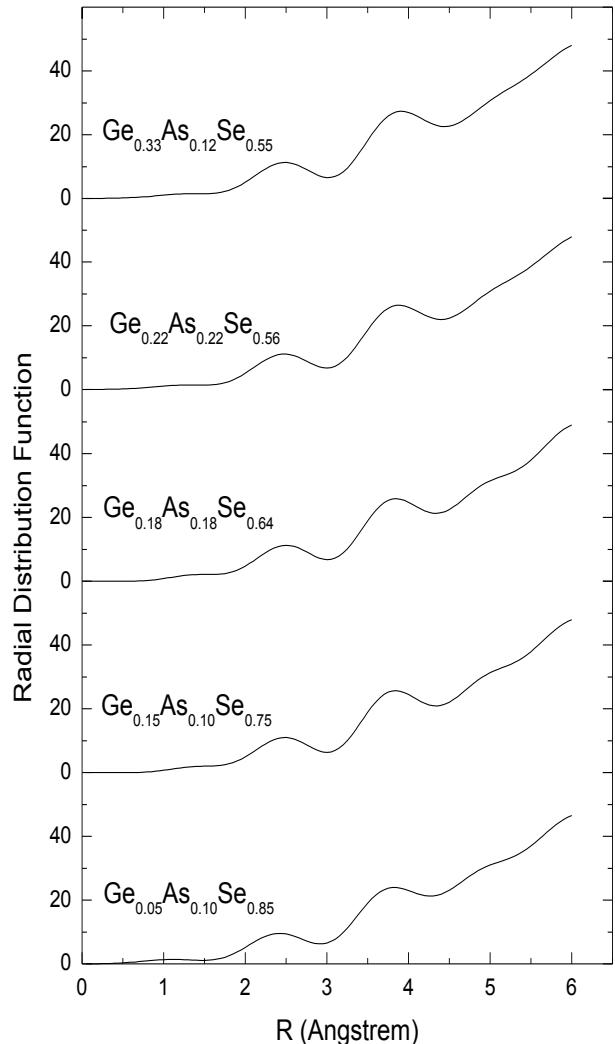


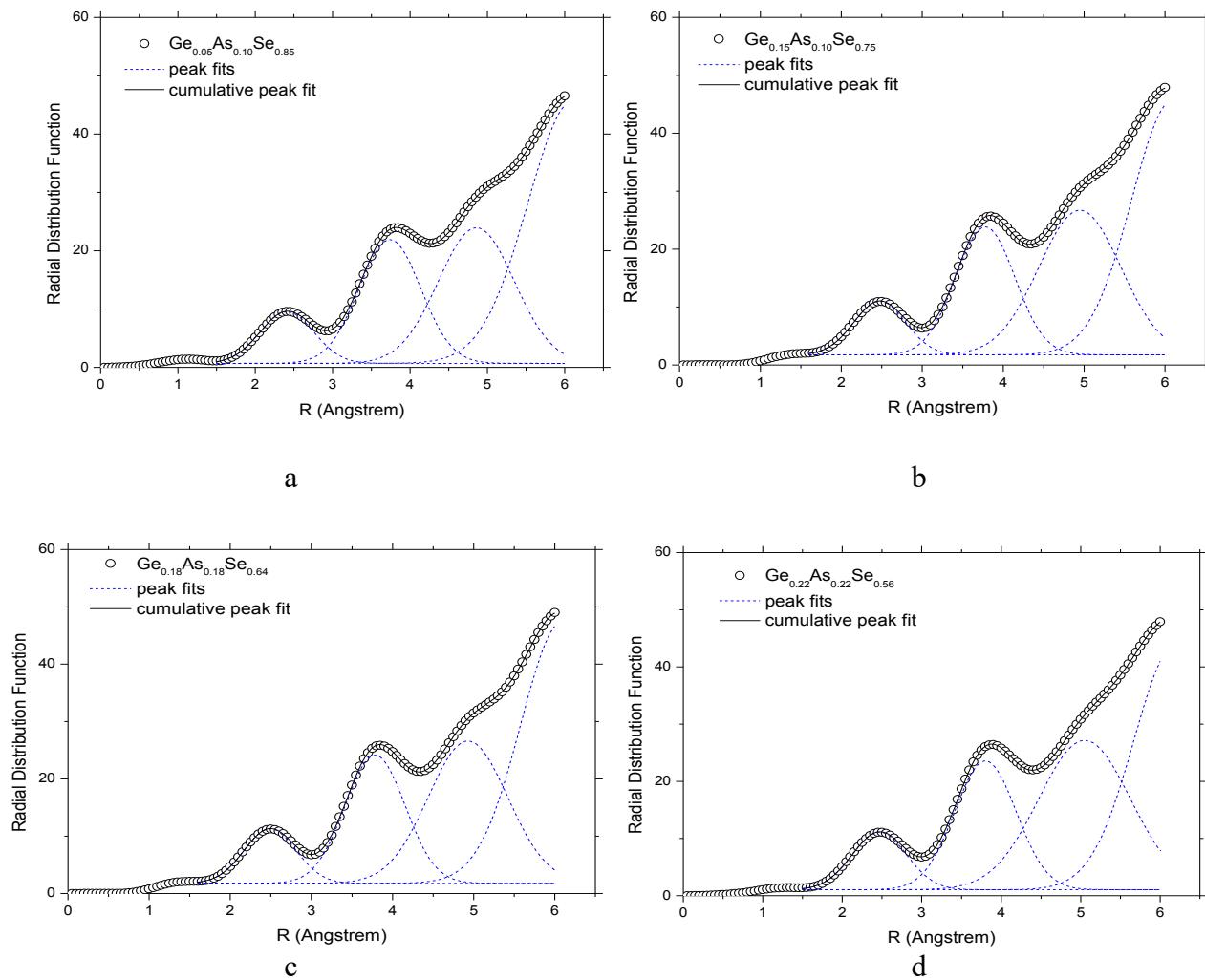
Fig. 1
Radial distribution functions of $\text{Ge}_x\text{As}_y\text{Se}_{(1-x-y)}$ glasses.

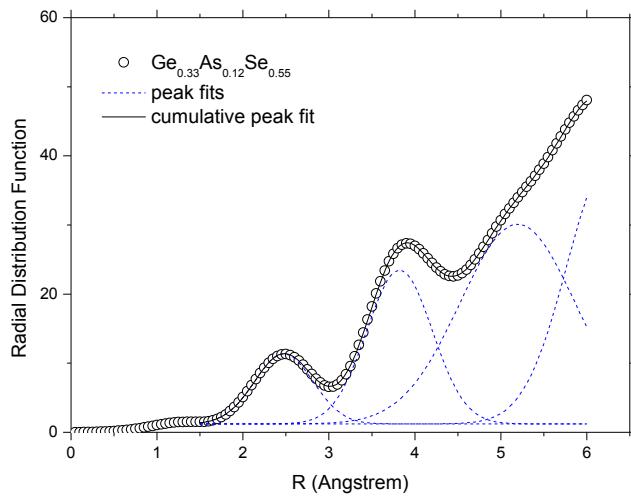
The RDF curves obtained from experimental data were reconstructed using Gaussian functions to fit the peaks (Fig 2). The radii of the first, r_1 , and second, r_2 , coordination spheres obtained from the corresponding fit peak positions are presented in Table 1. The areas under corresponding peaks provide the number of atoms in the first and second coordination spheres (Table 1). The area under the first coordination peak was calculated using

$$Q_1^{\text{cal}} = \sum_{i=1}^3 b_{ij} K_i K_j n_{ij}, \quad (3)$$

where n_{ij} represents the number of atoms of type j around an atom of type i and b_{ij} is a coefficient counting for partial contribution of atomic pairs and obtained from CON model considerations [5, 7, 8]. The calculations were based on the model

assumption that constituent atoms form predominantly Ge-Se and As-Se heteropolar bonds and exhibit “8-N” coordinations. The coordinations of the atoms were taken as 4 for Ge, 3 for As and 2 for Se and Ge-Se bonds were considered to have priority. Then, Q_1^{cal} was compared to Q_1^{exp} , the area under the peak obtained from fit of the RDF curves (Table 1). Apparently, the two values are in good agreement within the calculation and experimental errors, supporting the model assumptions. The more discrepancy in the stoichiometric $\text{Ge}_{0.18}\text{As}_{0.18}\text{Se}_{0.64}$ glass and glasses with selenium excess is related to the assumption on predominant probability of heteropolar bonds in these compositions. In real glasses, however, formation of small amount of homopolar bonds is possible.



**Fig. 2**

Deconvolution of the radial distribution functions of the Ge-As-Se glasses: (a) – $\text{Ge}_{0.05}\text{As}_{0.10}\text{Se}_{0.85}$, (b) - $\text{Ge}_{0.15}\text{As}_{0.10}\text{Se}_{0.75}$, (c) - $\text{Ge}_{0.18}\text{As}_{0.18}\text{Se}_{0.64}$, (d) - $\text{Ge}_{0.22}\text{As}_{0.22}\text{Se}_{0.56}$, (e) - $\text{Ge}_{0.33}\text{As}_{0.12}\text{Se}_{0.55}$. Circles are the calculated data, dashed lines denote Gaussian functions and solid lines represent the cumulative fit curves.

Table 1

Local structure parameters of $\text{Ge}_x\text{As}_y\text{Se}_{(1-x-y)}$ glasses.

Composition	Q_1^{cal} , (a.u.)	Q_1^{exp} , (a.u.)	R_1 , (Å)	R_2 , (Å)
$\text{Ge}_{0.05}\text{As}_{0.1}\text{Se}_{0.85}$	8.71	7.72	2.41	3.74
$\text{Ge}_{0.1}\text{As}_{0.1}\text{Se}_{0.75}$	8.38	7.41	2.47	3.78
$\text{Ge}_{0.18}\text{As}_{0.18}\text{Se}_{0.64}$	7.97	7.61	2.49	3.79
$\text{Ge}_{0.22}\text{As}_{0.22}\text{Se}_{0.56}$	8.82	8.68	2.47	3.80
$\text{Ge}_{0.33}\text{As}_{0.12}\text{Se}_{0.55}$	8.80	8.64	2.48	3.82

SUMMARY

We have studied the XRD powder patterns of $\text{Ge}_x\text{As}_y\text{Se}_{(1-x-y)}$ glasses. The powder patterns have been analyzed to calculate atomic radial distribution functions for the glasses. The radii of the first and second coordination spheres have been determined through Gaussian fits to the RDFs. Area under the first coordination peak calculated based on the chemically ordered network model assumptions have been found in good agreement with those found from the fit, supporting the structural model with predominance of heteropolar bonds and “8-N” coordinations of constituent atoms.

1. A.Zakery, S.R.Elliott. *Optical properties and applications of chalcogenide glasses: a review*, *J. Non-Cryst. Solids*, **330** (2003) 1-12.
2. Richard Zallen. *The Physics of Amorphous Solids*, Wiley-VCH, Weinheim, (2004).
3. C.Rosenhahn, S.Hayes, G.Brunklaus, H.Eckert. in: J.C. Phillips, M.F. Thorpe (Eds.), *Phase Transitions and Self-organisation in Electronic and Molecular Networks*, Springer, New York (2001) 123–142.
4. Z.U.Borisova. *Glassy semiconductors*, Springer, New York, (1981).
5. E.Mammadov. *Evolution of the medium range order in ternary chalcogenide glasses revealed from XRD measurements*, *Azerbaijan Journal of Physics*, **XVIII** (2012) 47-48.
6. A.F.Skryshevskiy. *Structural Analysis of Liquids and Amorphous Solids*, Vysshaya shkola, Moscow (1980)
7. E.Mammadov, P.C.Taylor, D.Baker, D.Bobela, A.Reyes, P.Kuhns, S.Mehdiyeva. *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, **1160** (2009) 171-176.
8. E.Mammadov, P.C.Taylor. *Nuclear quadrupole resonance study of local structure of the Ge-As-Se*

ternary chalcogenide glasses, *J. Non-Cryst. Solids*, **354** (2008) 2732–2735.

9. G.Lucovsky, T.M.Hayes. in: M.H. Brodsky (Ed.), *Amorphous Semiconductors*, Springer, Berlin (1979) 215–250.

$\text{Ge}_x\text{As}_y\text{Se}_{(1-x-y)}$ ŞÜŞƏLƏRDƏ ATOMLARIN RADİAL PAYLANMA FUNKSIYALARI.

S.İ.MEHDİYEVƏ, E.A.MƏMMƏDOV, A.E.MƏMMƏDOVA

$\text{Ge}_x\text{As}_y\text{Se}_{(1-x-y)}$ şüşələrin tozlarının rentgenogrammaları analiz edilərək atomların radial paylanma funksiyaları (RPF) hesablanmış, RPF-dən birinci və ikinci koordinasiya sferalarının radiusları təyin edilmişdir. Birinci koordinasiya pikinin sahəsi struktur modeli təsəvvürlərinə əsasən tapılmış və RPF əyrilərindən tapılan qiymətlə tutuşdurulmuşdur. Göstərilmişdir ki, alınan nəticələr heteropolyar əlaqələrə və “8-N” koordinasiyasına üstünlük verən Ge-As-Se struktur modelinə uyğun gelir.

ФУНКЦИИ РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АТОМОВ В СТЕКЛАХ $\text{Ge}_x\text{As}_y\text{Se}_{(1-x-y)}$.

С.И.МЕХТИЕВА, Э.А.МАММАДОВ, А.Э.МАММАДОВА

Порошковые рентгенограммы стекол $\text{Ge}_x\text{As}_y\text{Se}_{(1-x-y)}$ проанализированы для вычисления радиальных функций распределения (РФР) атомов. Радиусы первого и второго координационных сфер определены из РФР. Площадь под первым координационным пиком расчитан на основе предположений структурной модели и сопоставлен со значением определенным из кривых РФР. Полученные результаты подтверждают структурную модель Ge-As-Se с преимущественным образованием гетерополярных связей и “8-N” координаций составляющих атомов.

Редактор: акад. Дж.Абдинов

PACS:33.20.t;33.20.Vq

THE ROTATIONAL SPECTRUM OF GAUCHE-ISOPROPYL ALCOHOL ($\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$

A.A.ADILOV, Ch.O.QAJAR, F.H.MAMMADOV, A.S.QASANOVA

Institute of Physics Academy of Science of Azerbaijan

Az-1143, Baku, G.Javid ave. 131

farkh.zenooz.2010@mail.ru

Received: 15.05.2015

Accepted: 22.06.2015

Keywords: submillimeter-wave spectrum, internal rotation, centrifugal distortion, rotational constants

REFERAT

The submillimeter-wave spectrum of the gauche-form isopropyl alcohol was studied in the frequency range from 240 to 480 GHz. More than 131 lines were assigned to ground state transition. The identification of the high J transitions was checked by centrifugal distortion analysis and internal rotation. The frequencies of all transitions were least squares fitted to the Watson's Hamiltonian, including parameters of internal rotation. The ground-state rotational constants are (in MHz)

fi

$$A^a = 8640.7384, B^a = 8061.3831, C^a = 768.2167$$

INTRODUCTION

In recent years, significant attention has been focused on the study of molecules containing the hydroxyl group. One of the main interest in these investigations was observation of rotational isomers. Preliminary study of microwave spectra of isopropyl alcohol ($\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ has shown the existence two stable conformers, the *trans*-and *gauche* variations of this molecule [1-10]. These conformers were investigated in detail Hirota [2]. Later, the spectroscopic constants of *gauche* isopropyl alcohol molecule have been considerably corrected by O.Ulenikov et.al. [3].

The microwave rotational spectrum of *trans* isopropyl alcohol ($\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ has been studied by a number of investigators [2, 4-5]. However, obtained spectroscopic constants uncertainties were too large. The frequencies of higher J transitions calculated by using these constants gives a large discrepancy with measured frequencies. This paper reports further studies of the ground-state rotational spectrum of gauche isopropyl alcohol. The investigations

have been extended into the submillimeter region within the range 240-480 GHz. Various Q -; R -, and P -branch high J transitions (band c -type) have been measured. More than 131 lines were assigned to ground state transition. All that permitted to determine more accurate values of the spectroscopic constants.

EXPERIMENTAL

The spectrum of isopropyl alcohol was recorded at room temperature at pressure below 2mTorr by using a video spectrometer at the University of Kharkov. The frequency measurement's accuracy is believed to be better than $\pm 50\text{kHz}$, except for very weak or overlapping lines.

The sample of ($\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ was obtained from BDH Chemical Co. and used without further purification.

RESULTS AND DISCUSSIONS

The molecule of isopropyl spirit will consist of two methyl and one hydroxyl the groups making internal rotation concerning ordinary

bonds C-C and C-0 accordingly. Presence of such rotary degree of freedom concerning bonds C-0 results in existence a trans- and gauche- conformer. A molecule the plane of symmetry has on gauche- conformer and exists as two of rotamer which structures are mirror reflection each other, and one of them turns out from another at tunneling hydrogen hydroxyl groups through a cis-barrier (a plane of symmetry of metallic groups). It results in strong complication of a rotary spectrum, and his{its} description within the framework of model of a nonrigid asymmetric top (Hamiltonian Watson) to become impossible. In this work for calculation of a spectrum has been used new reduced Hamiltonian, taking into account internal rotation of molecules such as asymmetric tops. The matrix of it Hamiltonian looks like:

$$\begin{aligned} & \langle s|H|s\rangle \langle s|H|a\rangle \\ & \langle a|H|s\rangle \langle a|H|a\rangle \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \langle s|H|s\rangle = & A_s J_x^2 + B_s J_y^2 + C_s J_z^2 - \Delta_j^s J^4 - \Delta_{jk}^s \\ & J^2 J_z^2 - \Delta_k^s J_z^4 - 0.5(\delta_j^s J^2 + \delta_k^s J_z^2, J_+^2 + J_-^2) + \\ & + H_j^s J^6 + H_{jk}^s J^4 J_z^2 + H_{kj}^s J^2 J_z^4 + H_k^s J_z^6 \\ & + 0.5(h_j^s J^4 + h_{jk}^s J^2 J_z^2 + h_k^s J_z^4, J_+^2 + J_-^2) \\ \langle a|H|a\rangle = & \Delta + A_a J_x^2 + B_a J_y^2 + C_a J_z^2 - \Delta_j^a J^4 \\ & - \Delta_{jk}^a J^2 J_z^2 - \Delta_k^a J_z^4 - 0.5(\delta_j^a J^2 + \delta_k^a J_z^2, J_+^2 + J_-^2) + \\ & + H_j^a J^6 + H_{jk}^a J^4 J_z^2 + H_{kj}^a J^2 J_z^4 + H_k^a J_z^6 + 0.5(h_j^a J^4 \\ & + h_{jk}^a J^2 J_z^2 + h_k^a J_z^4, J_+^2 + J_-^2) \\ \langle s|H|a\rangle = & 0.5R_{yx}^{sa} \{J_y, J_x\}_+ + 0.5R_{zx}^{sa} \{J_z, J_x\}_+ \\ & + iP_{yJ}^{sa} J^2 J_y + iP_{zJ}^{sa} J^2 J_z + i0.5P_{yx}^{sa} \{J_y, J_z\}_+ \\ & + i0.5P_{zx}^{sa} \{J_z, J_x\}_+ \\ \langle a|H|s\rangle = & \langle s|H^*|a\rangle \end{aligned}$$

$$R_{\alpha x}^{as} = -R_{\alpha x}^{sa}, P_{\alpha j}^{as} = -P_{\alpha j}^{sa}, P_{\alpha x}^{as} = -P_{\alpha x}^{sa},$$

where $\alpha = z, y$,

$A^s, B^s, C^s, A^a, B^a, C^a$ are the effective rotational constants; and where

$\Delta_j^s, \Delta_{jk}^s, \Delta_k^s, \delta_j^s, \delta_k^s, \Delta_j^a, \Delta_{jk}^a, \Delta_k^a, \delta_j^a, \delta_k^a$ are the effective quartic,

$H_j^s, H_{jk}^s, H_{kj}^s, H_k^s, h_j^s, h_{jk}^s, h_k^s, H_j^a, H_{jk}^a, H_{kj}^a, H_k^a, h_j^a, h_{jk}^a, h_k^a$ the effective sextic distortion;

$\Delta, R_{yx}^{sa}, R_{zx}^{sa}, P_{yj}^{sa}, P_{zj}^{sa}, P_{yx}^{sa}, P_{zx}^{sa}$ are the internal-rotational parameters.

With the purpose of the further diminution correlations of spectroscopic constants and according to their specification the return spectroscopic problem was solved with use reduced Hamiltonian. Use of it Hamiltonian has allowed to lower correlations of parameters among themselves and appreciably to specify spectroscopic constants. In result it is possible to count, that on received in the present work and earlier in work [6] spectroscopic it is possible for constants with accuracy sufficient for many practical purposes to predict frequencies any transitions as a trance and of gauche-conformer molecules of isopropyl.

The six rotational constants, seven internal-rotational parameters, twenty four centrifugal distortion constants, and correlation matrix of isopropyl alcohol are given in Table 1a and Table 1b. The rotational constants obtained are two orders of magnitude more accurate of those reported formerly [7].

Table 1a

Rotational constants, the internal-rotational parameters and centrifugal distortion coefficients of the gauche isopropyl alcohol.

PAR (MHS)	OLD VALUE	NEW VALUE
A _S	8638.34426(307)	8638.34114(007)
B _S	8065.08358(260)	8065.11027(118)
C _S	4768.28623(231)	4768.27684(095)
A _a	8640.72246(291)	8640.73843(061)
B _a	8061.37443(266)	8061.38308(119)
C _a	4768.21958(226)	4768.21670(094)
Δ	46798.9747(283)	46798.94898(204)
R _{CA}	57.238629(784)	114.555901(055)
R _{AB}	32.621600(243)	65.209506(136)
P _C	0.0046950(427)	-0.0073652(166)
P _B	-0.0132559(492)	-0.0162454(167)
P _{CA}	--	0.0130993(376)
P _{AB}	0.01507400(229)	0.0183270(247)
D _{J,S}	0.00434317(927)	0.00830543(201)
D _{JK,S}	-0.00266500(427)	-0.01501353(075)
D _{K,S}	0.00689190(418)	0.00775344(065)
d _{J,S}	0.00163128(448)	-0.00031739(008)
d _{K,S}	0.00195680(150)	0.01480323(258)

D _{J,A}	0.00381218(742)	0.00770272(238)				
PAR (MHs)	OLD VALUE	NEW VALUE	PAR (MHs)	OLD VALUE	NEW VALUE	
D _{JK,A}	-0.00153860(297)	-0.01340670(080)	h _{K,S}		0.000002620(129)	
D _{K,A}	0.00610930(294)	0.00677612(063)	H _{J,A}		0.000000251(002)	
d _{J,A}	0.00137027(363)	-0.00059374(094)	H _{JK,A}		-0.000000092(002)	
d _{K,A}	0.00255130(124)	0.00976137(030)	H _{KJ,A}		-0.000001430(057)	
H _{J,S}		0.00000011(002)	H _{K,A}		0.000001221(039)	
H _{JK,S}		-0.00000105(002)	h _{J,A}		-0.000000187(001)	
H _{KJ,S}		0.00000072(006)	h _{JK,A}		0.000002963(018)	
H _{K,S}		0.00000017(004)	h _{K,A}		0.000003286(134)	
h _{J,S}		0.00000009(001)				
h _{JK,S}		0.000003418(015)				Standard deviation of fit is 0.188806775

Table 1b

Correlation matrix for the ground state gauche isopropyl alcohol

A _S	1.000																												
B _S	-0.047	1.000																											
C _S	0.206	0.406	1.000																										
A _A	0.624	0.142	0.187	1.000																									
B _A	0.206	0.697	0.402	0.086	1.000																								
C _A	0.212	0.441	0.901	0.221	0.448	1.000																							
DELTA	0.158	0.272	0.222	-0.035	-0.082	0.027	1.000																						
R _{CA}	-0.070	0.050	0.089	0.042	0.040	0.164	-0.098	1.000																					
R _{AB}	-0.161	0.139	0.021	-0.050	-0.109	-0.035	0.181	0.113	1.000																				
P _C	-0.149	0.042	0.029	-0.023	-0.053	-0.017	0.110	0.280	0.696	1.000																			
P _B	-0.153	0.095	0.057	0.026	-0.028	0.042	0.068	0.544	0.709	0.846	1.000																		
P _{CA}	0.182	-0.089	-0.027	0.042	0.082	0.031	-0.148	-0.225	-0.846	-0.956	-0.809	1.000																	
P _{AB}	-0.010	0.045	0.027	0.141	0.038	0.055	-0.048	0.305	0.143	0.253	0.568	-0.114	1.000																
D _{J,S}	0.387	0.473	0.093	0.357	0.316	0.101	0.249	-0.096	0.058	-0.038	-0.008	0.020	0.054	1.000															
D _{JK,S}	-0.111	-0.194	0.190	-0.204	-0.078	0.136	-0.083	0.054	-0.391	-0.406	-0.373	0.406	-0.207	-0.632	1.000														
D _{K,S}	0.032	0.141	0.101	0.147	0.067	0.121	0.062	-0.015	0.436	0.494	0.451	-0.484	0.218	0.445	-0.888	1.000													
d _{J,S}	-0.143	0.862	0.315	0.112	0.419	0.339	0.299	0.007	0.236	0.057	0.148	-0.133	0.079	0.488	-0.360	0.316	1.000												
d _{K,S}	0.011	0.119	0.053	0.160	-0.090	-0.002	0.191	0.059	0.677	0.724	0.675	-0.739	0.319	0.273	-0.662	0.685	0.298	1.000											
D _{J,A}	0.294	0.296	0.085	0.339	0.636	0.116	-0.192	0.041	-0.224	-0.036	-0.049	0.110	0.062	0.516	-0.247	0.151	0.003	-0.076	1.000										
D _{JK,A}	-0.249	-0.110	0.142	-0.218	-0.373	0.110	0.164	0.052	0.548	0.457	0.440	-0.509	0.094	-0.305	0.129	0.020	0.098	0.340	-0.716	1.000									
D _{K,A}	0.228	0.111	0.085	0.175	0.304	0.152	-0.130	-0.026	-0.597	-0.547	-0.504	0.590	-0.127	0.212	-0.007	0.003	-0.055	0.390	0.530	-0.901	1.000								
d _{J,A}	0.107	0.515	0.303	0.050	0.883	0.341	-0.154	0.107	-0.048	0.123	0.126	-0.069	0.089	0.096	-0.045	0.075	0.224	-0.027	0.689	-0.416	0.315	1.000							
d _{K,A}	0.250	-0.015	0.037	0.200	0.223	0.089	-0.192	-0.114	-0.762	-0.700	-0.647	0.762	-0.104	0.043	0.291	-0.354	-0.174	-0.459	0.411	-0.743	0.759	0.203	1.000						
H _{J,S}	0.268	0.290	-0.016	0.274	0.148	-0.002	0.171	-0.101	0.071	-0.003	0.007	-0.009	0.031	0.917	-0.690	0.518	0.364	0.283	0.442	-0.274	0.180	-0.035	-0.014	1.000					
H _{JK,S}	0.173	-0.080	0.060	0.053	-0.069	0.030	0.040	0.042	-0.280	-0.272	-0.283	0.293	0.102	-0.165	0.482	-0.516	-0.189	0.317	-0.116	-0.077	0.131	-0.153	0.308	-0.270	1.000				
H _{KJ,S}	-0.230	0.053	-0.012	-0.121	0.055	-0.004	-0.051	-0.003	0.240	0.215	0.242	-0.249	-0.175	-0.003	-0.244	0.316	0.125	0.183	0.049	0.123	-0.149	0.165	-0.276	0.066	-0.959	1.000			
H _{K,S}	0.244	-0.046	0.021	0.143	-0.046	0.020	0.051	-0.012	-0.218	-0.180	-0.216	0.222	0.205	0.054	0.148	-0.210	-0.100	0.123	-0.029	-0.127	0.158	-0.161	0.252	0.001	0.921	-0.992	1.000		
h _{J,S}	-0.138	0.676	0.236	0.107	0.200	0.256	0.294	-0.028	0.304	0.069	0.158	-0.166	0.100	0.429	-0.402	0.366	0.937	0.387	0.202	0.248	-0.181	-0.007	-0.256	0.357	-0.104	0.007	0.031	1.000	
h _{JK,S}	0.124	0.100	0.035	0.236	-0.113	-0.009	0.159	-0.170	0.178	0.082	0.093	-0.113	0.171	0.396	-0.512	0.464	0.314	0.711	-0.056	-0.028	0.050	-0.190	0.120	0.396	-0.104	-0.033	0.084	0.432	1.000

$h_{K,S}$ 0.240-0.043 0.015 0.153-0.051 0.012 0.062 0.008-0.118-0.060-0.107 0.106 0.260 0.070 0.070-0.132-0.088-0.018-0.030-0.062 0.069-0.151 0.153 0.031 0.881-0.972 0.987 0.058 0.106 1.000
 $H_{J,A}$ 0.246 0.183 0.018 0.269 0.513 0.048-0.187 0.043-0.255-0.029-0.054 0.120 0.049 0.464-0.253 0.158-0.086-0.107 0.952-0.732 0.553 0.609 0.401 0.488-0.175 0.099-0.076-0.291-0.097-0.076 1.000
 $H_{JK,A}$ 0.082-0.135 0.044 0.032-0.137 0.073 0.033-0.111 0.082 0.159 0.080-0.093 0.308-0.072-0.032 0.074-0.057 0.200-0.279 0.439-0.400-0.219-0.233-0.056 0.422-0.541 0.592 0.151 0.125 0.645-0.342 1.000
 $H_{KJ,A}$ -0.179 0.107-0.011-0.113 0.039-0.048 0.000 0.109 0.063-0.060 0.021-0.030-0.328-0.029 0.072-0.064 0.095-0.122 0.075-0.166 0.161 0.115 0.031-0.045-0.535 0.683-0.738-0.085-0.140-0.779 0.125-0.953 1.000
 H_{KA} 0.210-0.091 0.020 0.138-0.009 0.064-0.008-0.100-0.123 0.009-0.068 0.087 0.324 0.057-0.072 0.060-0.100 0.083-0.015 0.062-0.047-0.084 0.051 0.071 0.579-0.730 0.786 0.067 0.146 0.818-0.060 0.913-0.992 1.000
 $h_{J,A}$ 0.129 0.403 0.255 0.083 0.786 0.288-0.171 0.110-0.103 0.099 0.101-0.027 0.125 0.014 0.023 0.009 0.113-0.067 0.683-0.466 0.368 0.972 0.271-0.119-0.072 0.098-0.101-0.115-0.218-0.097 0.627-0.224 0.098-0.058 1.000
 $h_{JK,A}$ 0.208 0.048 0.079 0.262 0.292 0.124-0.192 0.045-0.429-0.224-0.189 0.316 0.139 0.054 0.036-0.054-0.127-0.006 0.532-0.646 0.598 0.401 0.824-0.010 0.140-0.145 0.144-0.225 0.325 0.103 0.508-0.200 0.014 0.053 0.471 1.000
 $h_{K,A}$ 0.241-0.093 0.016 0.154-0.004 0.057-0.012-0.110-0.212-0.090-0.162 0.184 0.283 0.075-0.021-0.010-0.118-0.012 0.011-0.018 0.032-0.101 0.148 0.087 0.648-0.791 0.840 0.044 0.119 0.862-0.028 0.864-0.968 0.987-0.067 0.093 1.000

This work was supported by the Science Development Foundation under the President of the Republic of Azerbaijan-Grant № EIF-BGM-2-BRFTF-1-2012/2013-07/04/1

1. S.Kondo, E. Hirota. Microwave Spectrum and Internal Rotation of Isopropyl Alcohol. *J. Mol. Spectrosc.*, **34** (1970) 97-107.
2. E.Hirota. Internal Rotation in Isopropyl Alcohol Studied by Microwave Spectroscopy, *J. Chem. Phys.*, **83** (1979) 1457-1465.
3. O.N.Ulenikov, A.B.Malikova, Ch.O.Qajar, S.A.Musaev, A.A.Adilov, M.I.Mehtiev. On The Analysis of the Gauche-form Microwave Spectrum of the Isopropyl Alcohol Molecule, *J.Mol.Spectrosc.*, **145** (1990) 262-269.
4. А.А.Абдурахманов, М.Н.Елчиев, Л.М.Иманов. Микроволновый спектр транс-формы молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$, Изв. АН Азерб. CCP, сер. ФТМН, № 5 (1970) 58-62.
5. Ch.O.Qajar, S.M.Musaev, M.A.Mehtiev, A.A.Adilov, O.V.Naumenko, A.B.Malikova, O.N.Ulenikov. On the Investigation of Internal rotations in $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ and $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ molecules, Abstr. XI Colloquium High Resolution Molecular Spectroscopy, Giessen, West Germany, (1989) 18
6. A.A.Adilov. Internal rotation and double quantum resonances. The dissertation on competition of the candidate of physical and mathematical sciences, Baku 1994, branch scientifically research Institute of Photoelectronics.
7. S.A.Musatayev. Hybrid radiospectrometer, internal rotation and centrifugal indignation of high orders in molecules of ethanol and isopropanol, The dissertation on competition of the doctor of physical and mathematical sciences, Baku 2002, Institute of Physics, National Academies of Sciences of Azerbaijan.

İZOPROPİL SPİRTİ MOLEKULUNUN QOS-KONFORMERİNİN FIRLANMA SPEKTRİ

A.Ə.ADILOV, Ç.O.QACAR, F.H.MƏMMƏDOV, A.S.HƏSƏNOVA

İzopropil spirti molekulunun qos-konformerinin rəqsi-firlanma spektrində 17-78 Qhs tezliklər diapazonunda qadağan olunmuş keçidlərin axtarışları aparılmışdır. 54 qadağan olunmuş rəqsi-firlanma keçidi identifikasiya edilmişdir.

ВРАЩАТЕЛЬНЫЙ СПЕКТР ГОШ-КОНФОРМЕРА МОЛЕКУЛЫ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА

А.А.АДИЛОВ, Ч.О.КАДЖАР, Ф.Х.МАММАДОВ, А.С.ГАСАНОВА

Проведен поиск запрещенных переходов в колебательно-вращательном спектре гош-конформера молекулы изопропанола в диапазоне частот 17÷78ГГц. Идентифицировано 54 запрещенных колебательно-вращательных переходов.

УДК 537.311.33

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОМПОНЕНТОВ В КРИСТАЛЛАХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ InSb-AlSb, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ПОДПИТКИ РАСПЛАВА ВТОРЫМ КОМПОНЕНТОМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ InSb ЗАТРАВКИ

П.Г.АЖДАРОВ, М.А.АКПЕРОВ, А.И.АЛЕКПЕРОВ, З.М.ЗАХРАБЕКОВА

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавида, 131
zangi@physics.ab.az

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

В пфанновском приближении решена задача по аксиальному концентрационному распределению компонентов в кристаллах твёрдых растворов системы InSb- AlSb при выращивании из стартового InSb расплава, подпитываемого слитком второго компонента (AlSb). Получены математические соотношения, определяющие зависимости концентраций компонентов по длине кристаллов, при различных режимах кристаллизации и подпитки расплава. Анализ кривых, по рассчитанным концентрационным профилям компонентов в кристаллах, определяет оптимальные технологические параметры и режимы для получения слитков InSb-AlSb с заданным переменным и однородным по составу участками во всём непрерывном ряду твёрдых растворов этих соединений.

Ключевые слова: InSb, AlSb, твёрдые растворы, затравка, подпитка расплава, сегрегация компонентов, пфанновское приближение, однородный кристалл.

В широком ряду полупроводниковых твёрдых растворов лидирующее место занимают алмазоподобные системы. Одним из перспективных является квазибинарная система InSb- AlSb. Составные компоненты этой системы растворяются друг в друге в любых соотношениях, как в твёрдом, так и в жидким состояниях [1]. Большое различие в ширинах запрещённых зон InSb ($\sim 0.23\text{эВ}$) и AlSb ($\sim 1.55\text{эВ}$) открывает возможность прецизионно управлять электронными свойствами твёрдых растворов этих соединений и параметрами примесных центров в широких пределах путём простого изменения состава матрицы.

В настоящей работе выполнено математическое моделирование распределения компонентов в монокристаллах твёрдых растворов InSb- AlSb, выращенных модифицированным методом Чохральского [2-4] из стартового расплава InSb, подпитываемого стержнем второго компонента AlSb. Заметим, что преимуществами такой модификации метода Чох-

ральского являются следующие обстоятельства. Известно, что для получения объёмных и совершенных монокристаллов полупроводниковых материалов наиболее эффективным является метод Чохральского. В случае твёрдых растворов бинарных систем, использование традиционного метода Чохральского приводит к росту кристалла с переменным составом, в связи с сегрегацией компонентов при кристаллизации расплава [2-4]. Для предотвращения влияния сегрегации на состав расплава растущего кристалла, применяются различные методы [2-9]. Суть этих методов сводится к непрерывной подпитке расплава одним или обеими его компонентами, которая приводит к поддержанию состава растущего кристалла постоянным в процессе всего цикла кристаллизации. С точки зрения практического осуществления и прецизионного управления скоростью подпитки расплава, наиболее эффективным является метод подпитки расплава вторым компонентом, коэффициент сегрега-

ции которого превышает единицу. Другая проблема, в деле выращивания монокристаллов полупроводниковых твёрдых растворов из расплавов различного состава, является отсутствие набора адекватных по составу монокристаллических затравок [4,7]. В рассматриваемом нами случае эта проблема отпадает.

Цель работы – установление оптимальных операционных технологических параметров и режимов для получения объёмных монокристаллов системы InSb-AlSb с заданным однородным и переменным составами методом Чохральского из подпитываемого AlSb стержнем расплава.

Концептуальная модель, заложенная в основу математического моделирования аксиального концентрационного распределения компонентов в кристаллах, заключается в следующем. С момента установления фронта кристаллизации между затравкой и расплавом из InSb, проводится соприкосновение подпитывающего стержня из AlSb с расплавом. Затем, одновременно включаются механизмы вытягивания кристалла и погружения подпитывающего стержня в расплав. На первом этапе такого режима происходит постепенное увеличение концентрации второго компонента в расплаве и растущем кристалле до определённого значения. Затем наступает режим насыщения расплава и рост однородного кристалла [2]. Задача сводится к определению концентрационного профиля компонентов вдоль длины кристалла при различных режимах кристаллизации и подпитки расплава и выбору оптимальных условий для роста кристалла с заданными параметрами.

Введём следующие обозначения: V_m^0 и V_m – объёмы расплава в тигле в стартовый и текущий моменты; V_c – объём расплава кристаллизующийся в единицу времени; V_f – объём подпитки из AlSb, растворяющийся в расплаве в единицу времени; С – общее количество второго компонента в расплаве; C_m , C_c – молярные доли второго компонента в расплаве и кристалле соответственно; $\alpha = V_f/V_c$ – отношение скоростей подпиты-

вания и кристаллизации расплава; $K = C_c/C_m$ – равновесный коэффициент сегрегации AlSb; t – время.

Согласно пфаниновскому приближению, считаем выполнение следующих условий [2, 3]: в расплаве отсутствует испарение и разложение компонентов; диффузия компонентов в твёрдой фазе пренебрежимо мала; скорости диффузии молекул InSb и AlSb в расплаве достаточно высоки и обеспечивают его однородность по всему объёму; фронт кристаллизации плоский; на фронте кристаллизации имеет место равновесие между твёрдой и жидкой фазами.

По условию задачи, скорость кристаллизации расплава (V_c) и подпитки его (V_f) принимаются заданными и не зависящими от времени и тогда, в принятых обозначениях, имеем:

$$\begin{aligned} \dot{V}_m &= -V_c + V_f, \quad V_m = V_m^0 - (V_c - V_f)t, \\ \dot{C} &= -V_c C_m K + V_f. \end{aligned} \quad (1)$$

Учитывая, что доля второго компонента в расплаве $C_m = C/V_m$, имеем

$$\frac{dC_m}{dt} = \frac{\dot{C}V_m - \dot{V}_m C}{V_m^2} = \frac{\dot{C} - \dot{V}_m C_m}{V_m}. \quad (2)$$

С учётом уравнений (1) из (2) после интегрирования и ряда преобразований получим

$$\gamma = \frac{1}{1-\alpha} \left\{ 1 - \exp \left[- \int_0^{C_m} \frac{dC_m(1-\alpha)}{C_m(1-K-\alpha)+\alpha} \right] \right\}, \quad (3)$$

здесь введено обозначение $\gamma = V_c t / V_0$, определяющее относительную долю закристаллизованного расплава в момент времени t .

Уравнение (3) определяет концентрационный профиль второго компонента вдоль кристалла твёрдого раствора, выращенного в режиме непрерывной подпитки расплава этим компонентом при стартовом значении состава расплава $C_m = 0$.

Для решения интеграла в (3) требуется знание аналитической зависимости коэффици-

ента сегрегации К от C_m . В работе [10] представлен график зависимости К от C_m и C_c , построенный на основе данных диаграммы фазового состояния системы InSb(1-x)AlSb(x) в сопряжённых точках твёрдой и жидкой фаз. Показано, что значение К для AlSb изменяется сложным образом от ~70 при $x \rightarrow 0$, до значения равного 1 при $x \rightarrow 1$ и не поддаётся математическому описанию. Используя данные [10], интеграл в уравнении (3) вычисляли численным методом [2]. На Рис.1 представлены, рассчитанные таким образом, зависимости состава кристалла C_c от γ для трёх различных режимов роста кристалла, определяемых параметром $\alpha = V_f / V_c$.

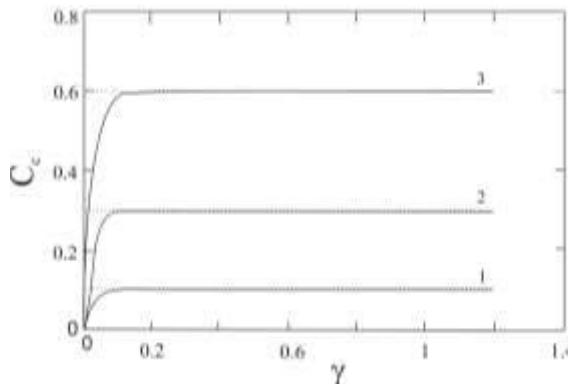


Рис.1

Зависимости состава кристалла C_c от γ . Кривые 1, 2 и 3 отвечают режимам роста кристаллов InSb-AlSb при $\alpha_1 = 0.098$, $\alpha_2 = 0.297$, $\alpha_3 = 0.594$, соответственно.

Кривые 1, 2 и 3 отвечают значениям α , соответствующим режимам роста однородных кристаллов InSb(1-x)AlSb(x) с составами $x=0.10$, 0.30 и 0.60 соответственно, которые вычисляли по следующим формулам [2]

$$C_m^* = \frac{\alpha}{K - 1 + \alpha}, \quad C_c^* = \frac{K\alpha}{K - 1 + \alpha} \quad (4)$$

Как видно из Рис.1, для всех режимов роста кристалла концентрация AlSb, увеличиваясь по длине слитка, стремится к насыщению. Скорость роста C_c от γ на начальном участке кристалла и состав его в последующем

однородном участке C_c^* зависят от величины α . Это обстоятельство позволяет управлять концентрационным профилем компонентов в кристаллах твёрдых растворов InSb-AlSb, как путём задания конкретных значений операционному технологическому параметру α для всего цикла кристаллизации расплава, так и периодическим изменением этого параметра в процессе роста кристалла. Заметим, что размер начального участка с переменным составом в рассматриваемой системе твёрдых растворов значительно меньше, чем в других алмазоподобных твёрдых растворах при выращивании их этим же методом. Так, например, для классической системы Si-Ge размер начального участка с переменным составом для заданных значений C_c^* [2] в несколько раз превышает соответствующие значения для InSb-AlSb. Такое различие связано с тем, что при равных соотношениях компонентов в расплаве значение коэффициента сегрегации второго компонента в системе InSb-AlSb значительно выше, чем в системе Si-Ge [4]. Как видно из Рис.1, достаточно малые размеры участков с переменным составом, ведущие к большему выходу материала с однородной частью, делают данную технологию, несомненно, перспективной для получения монокристаллов InSb-AlSb с заданным составом. Заметим, что проблема, связанная с отсутствием набора адекватных затравок, для выращивания монокристаллов из расплавов различного состава, в данном случае отпадает. Это связано с тем, что здесь стартовый расплав состоит только из первого компонента (InSb).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе вышеизложенных данных и результатов можно сделать следующее заключение. Математическое моделирование распределения компонентов вдоль кристаллов InSb-AlSb демонстрирует перспективность метода подпитки расплава вторым компонентом с использованием затравки первого компонента для выращивания однородных монокристаллов твёрдых растворов этой системы.

1. В.С.Земсков, В.Б.Лазарев. *Твёрдые растворы в полупроводниковых системах*, Наука, Москва, (1978)197.
2. G.Kh.Azhdarov, T.Kucukomeroglu, A.Varilci et al. *Distribution of components in Ge-Si bulk single crystals grown under continuous feeding of the melt with the second component (Si)*, *J. Crystal Growth*, **226** (2001) 437-442.
3. В.М.Глазов, В.С.Земсков. *Физико-химические основы легирования полупроводников*, М.: Наука, (1967) 371.
4. J.Schilz, V.N.Romanenko. *Review bulk growth of silicon-germanium solid solutions// Journal of materials science: materials and electronics*, **6** (1995) 265-279.
5. T.A.Campbell, M.Schweizer, P.Dold et al. *Float zone growth and characterization of Ge_{1-x}Six (x<10at%) single crystals*, *J. Crystal Growth*, **226** (2001) 231-237.
6. G.Kh.Azhdarov, Z.A.Agamaliev, E.M.Islamzade. *Hybrid Technique for Growing Homogeneous Crystals of Semiconductor Solid Solutions from*
7. N.V.Abrosimov, S.N.Rossolenko, W.Thieme et al. *Czochralski growth of Si- and Ge-rich SiGe single crystals*, *J. Crystal Growth*, **174** (1997) 182-186.
8. G.Kh.Azhdarov, R.Z.Kyazimzade. *Growth of homogeneous single crystals of Ge-Si solid solutions by the modified Bridgeman method*, *Crystallography Reports*, **50** (2005) S149-S153.
9. G.Kh.Azhdarov, Z.M.Zeynalov, Z.A.Agamaliyev, A.I.Kyazimova. *Growth of single crystals of semiconductor solid solutions by double feeding of the melt method*, *Crystallography Reports*, **55** (2010)763-767.
10. П.Г.Аждаров, М.А.Акперов, А.И.Алекперов, В.Б.Мир-Багиров. *Моделирование распределения компонентов в монокристаллах InSb-AlSb, выращенных методами Чохральского и Бриджмена*, *Transactions of National Academy of Sciences of Azerbaijan, Series of Physics-Mathematical and Technical Sciences, Physics and Astronomy*, **XXXII №2** (2014) 59-62.

InSb MAYA KRİSTALININ İSTİFADƏSİ İLƏ İKİNCİ KOMPONENTLƏ QİDALANDIRILAN ƏRİNTİDƏN ALINAN InSb-AlSb MONOKRİSTALLARINDA KOMPONENTLƏRİN PAYLANMASININ MODELLƏŞDİRİLMƏSİ

P.H.ƏJDƏROV, M.Ə.ƏKPƏROV, Ə.İ.ƏLƏKPƏROV, Z.M.ZƏHRƏBƏYOVA

InSb maya kristalının istifadəsi ilə ikinci komponentlə (AlSb) qidalandırılan ərintidən alınan InSb-AlSb bərk məhlullarında komponentlərin aksial paylanma məsələsi Pfann yaxınlaşmasında həll edilib. Müxtəlif kristallaşma və ərintini qidalandırma rejimlərində alınan kristallarda komponentlərin paylanması əks etdirən riyazi tənliklər alınıb. Kristallarda nəzəri hesablamalarla alınan komponentlərin konsentrasiyon profilləri əyrilərinin analizi verilən bircinsli və dəyişən tərkibli InSb-AlSb bərk məhlullarının tam sırasını almaq üçün optimal texnoloji parametrləri və rejimləri müəyyən edir.

MODELING OF COMPONENTS DISTRIBUTION IN InSb-AlSb SOLID SOLUTION CRYSTALS GROWN BY THE FEEDING OF THE MELT WITH THE SECOND COMPONENT METHOD USING InSb SEED

P.G.AZHDAROV, M.A.AKPEROV, A.I.ALEKPEROV, Z.M.ZAKHRABEKOVA

A problem of axial components distribution in InSb-AlSb solid solution crystals grown under the continuous feeding of InSb melt with the second component (AlSb) has been solved in Pfann approximation. The mathematical equations for determination of the components concentration profile in crystals have been obtained for different crystallization and feeding rates of the melt. Analysis of the calculated concentration profiles in crystals defines the optimum technology parameters and regimes for growing of InSb-AlSb alloy crystals with desired graded and uniform composition in all range of the solid solutions.

Редактор: акад. М.Алиев

APS 621.039.531

STUDY OF OXIDES FORMED ON ELECTROLESS Ni-P LAYER AFTER OXIDATION IN H₂O₂ SOLUTION WITH GAMMA IRRADIATION

A.A.GARIBOV, T.N.AGAYEV, M.Y.HASHEMI

*Institute of Radiation Problems, Azerbaijan National Academy of Sciences
AZ 1143, Baku, B.Vakhabzade, 9
agayevteymur@rambler.ru*

Received: 14.05.2015

Accepted: 24.06.2015

ABSTRACT

The layer of Ni-P alloy have been coated on stainless steel 304 substrate by a electroless bath and have been evaluated the effects of oxidant environment hydrogen peroxide with gamma irradiation on the formed surface components at room temperature by surface analyze methods such as FTIR, XRD, SEM with EDX and mapping of layer cross section. Result of surface analysis and formation of (Ni₃(PO₄)₂) and P₂O₅ phases on oxidized surface with irradiation has been shown that oxidation of Ni-P layer in oxidant aqueous environment has been similar to reactor condition and started with preferential dissolution of Ni and this causes rich surface layer of phosphor and this layer prevented from higher dissolution of Ni. Then with excess of oxidant concentration, phosphor rich layer has converted to nickel phosphate and phosphor oxide phases. This layer distinctive with hard-wearing corrosion and it has been used to protect materials of the reactor structure from corrosion.

Keywords: electrolysis of Ni-P, surface morphology, gamma radiation, nickel phosphate, oxidation with H₂O₂.

INTRODUCTION

Electroless deposition process experienced numerous modifications to meet the challenging needs of a variety of industrial applications since Brenner and Riddell invented the process in 1946. Among the various types of electroless plating, electroless nickel has gained immense popularity due to their ability to provide a hard, wear and corrosion resistant surface [1,2] for these property, Ni-P alloys are used in many field due to excellent properties of coatings, such as primary water stress corrosion cracking(PWSCC) mitigation in nuclear power plant[3], as thin films to impede the incorporation of radionuclide's produced e.g. Co-60 from corrosion of structural materials stainless steels in BWR reactors[4] and these coatings can play a role of protective layer for structural parts in erosion and/ or erosion- corrosion environment

with high-velocity water[3], decrease of abrasion corrosion of zircalloy alloys in fuel claddings tubes [5].

Because the radiolysis of the primary coolant water in the Water-cooled nuclear reactors is often related to corrosion problems. The interaction of gamma radiation with aqueous solutions produces a host of transient radicals, ion and stable molecular species including H⁻, ·OH, e^{aq}, H₃O⁺, OH⁻, H₂, H₂O₂, O₂, and HO₂. 1-3 Species such as e^{aq}, H⁻ and H₂ can act as reducing agents, while others such as H₂O₂, ·OH, O₂, O₂ and HO₂ can act as oxidizing agents. The stable products of water radiolysis are molecular hydrogen, oxygen and hydrogen peroxide. H₂O₂ in particular plays an important role in the corrosion of the structural materials of reactor components [6-7]. However, effect of H₂O₂ such as water radiolysis products on oxidation of Ni-P coatings and component of

oxides formed on surface layer is still unknown. In this paper the attempt to explain effect of oxidation of Ni-P in H₂O₂ solution with gamma irradiation by surface analyze technique e.g. FTIR, XRD, EDX and mapping.

EXPERIMENTAL PROCEDURE

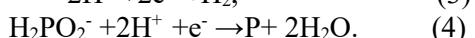
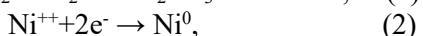
Preparation of coating electroless Ni-P alloy coatings were deposited on stainless steel AISI/SAE 304 substrates with dimension of 10mm*20mm*2mm. Prior to deposition, the samples was mechanically polished with 500÷1200 grit SiC abrasive paper and degreased in acetone. Then, specimens were thoroughly rinsed with deionized water and immersed in HCl 37% for deoxidization during 120 s. then activated in 10% Vol HCl+ 90%vol H₂SO₄ during 2÷3 s and finally rinsed again with deionized water. After these procedures, specimens were transfer immediately to the plating solution. The bath composition and the operation condition for the coatings deposition are given in the Table1.

Table 1

Chemical composition of the electroless nickel plating bath and operation condition

Chemical composition	
Nickel sulfate(NiSO ₄ .6H ₂ O)	21.2 g/lit
Sodiumhypophosphite (NaH ₂ PO ₂ .H ₂ O)	24g/lit
lactic acid	23 ml/lit
propionic acid	1.8 ml/lit
PH	4÷4.2
Temperature	85÷90°C
Agitation rat	600 rpm
Plating time	2h

The electroless Ni-P deposits as reactions (1-4) is formed on catalytic surfaces from reduction of Ni²⁺ ions by sodium-hypophosphite reducer



RESULTS AND DISCUSSION

It was investigated the structural analysis by means of X-ray diffraction analysis. It was shown the results of the XRD of the pattern of the Ni-P coating, before (Fig.1a) and after

(Fig.1b) its oxidation. For the as deposited Ni-P sample, as shown in Fig.1(a), only one broad peak around 2θ=45° was observed. (111) reflection of nickel shows an amorphous and micro crystal profile with a wide angular range of approximately 40÷60° (2θ). When the Ni-P sample was oxidized, a number of sharp peaks corresponding to P₂O₃ and (Ni₃(PO₄)₂) around 2θ =25÷30° was observed (1b) these phase transformation submitted by IR technique.

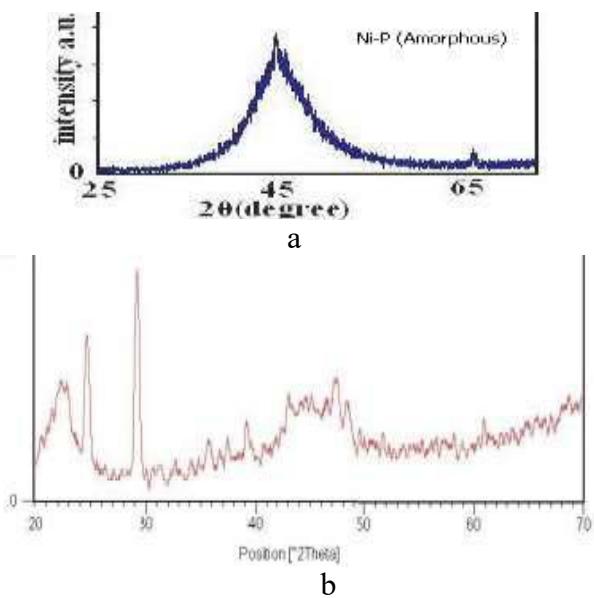
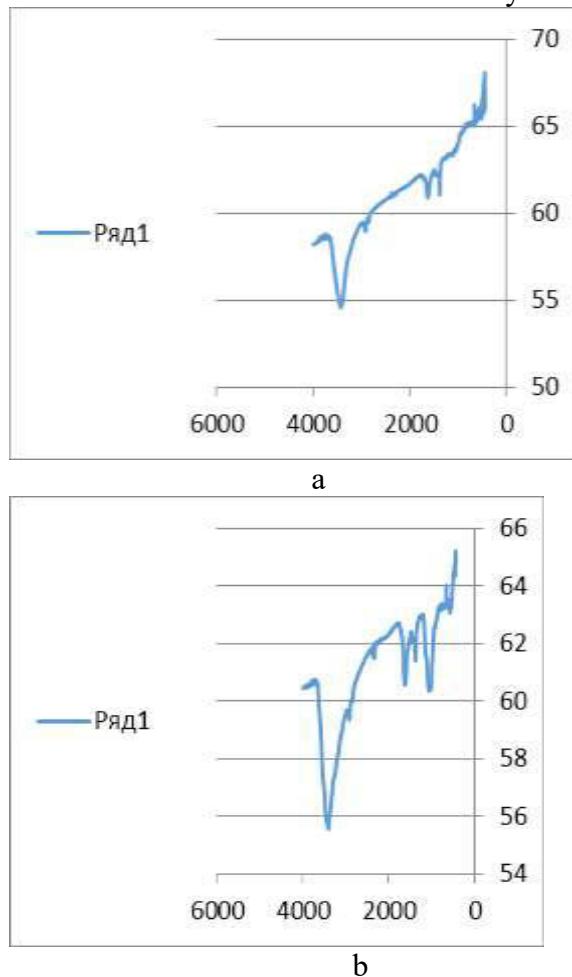


Fig.1
XRD of Ni-P layer: a) before, b) after oxidation

Infrared spectra, a detailed study of oxidation mechanism would not have been possible with out the use of vibrational spectroscopy for nickel phosphates. Infrared spectra were obtained to clarify the structural changes which take place in phosphate anions during oxidation. FTIR spectra were recorded by the KBr method at room temperature before and after oxidation. Fig.2(a) and (b) show the IR spectra of as deposited Ni-P and oxidation products in the system NiO-P₂O₅, respectively. The chain-type Ni (PO₃)₂ crystals exhibit peaks at 1287cm⁻¹ and 1321÷1340cm⁻¹, which are assigned to the V_{as}(PO₂) mode for the pyrophosphate Ni₂P₂O₇ crystals, the peak at 1205cm⁻¹ is assigned to the V_{as}(PO₃²⁻) mode, and for the orthophosphate crystals, the peak at ≈1080cm⁻¹ is assigned to the vas(PO₄³⁻) mode [8], in other words, the three peaks may be attributed

to PO₄ groups with 2, 3 and 4 nonbridging oxygen's, respectively. Curve 2 (b) indicates that only crystalline Ni₃(PO₄) is present in the final product at $\approx 1080\text{cm}^{-1}$ this strong effect is due to the formation of a new kind of chemical bonds, P-O bonds in amorphous meta- and pyrophosphates. The results obtained from the IR absorption spectra are consistent with those of XRD analysis.

**Fig.2**

FTIR spectra of the surface (a) As deposited Ni-P film (b) after oxidation in H₂O₂ solution

Fig.3(a) and (b) showed the cross sectional SEM micrographs of the Ni-P deposit before and after oxidation in H₂O₂ solution with gamma radiation. As seen, the Ni-P deposit is completely fragmented after oxidation. Fragments near the surface have been detached from the surface much probably due to polishing process.

Fig.4 and Fig.5 also showed the line scan and map analyses of the Ni-P deposit before and after oxidation.

Elemental analysis, the result of elemental analysis (EDX) and mapping of cross section Ni-P layer before and after oxidation show that concentration of phosphor and oxygen element increased after oxidation (Fig.6). for explained of this subject according with research [9] when the Ni-P layer is contacted with oxidant aqueous environment is similar to reactor condition for e.g. H₂O₂, its oxidation starts with preferential dissolution of Ni and this causes rich surface layer of Phosphor and this layer prevented from higher dissolution of Ni as illustrated in Fig 7. Then with excess of oxidant concentration, phosphor rich layer converted to nickel phosphate (Ni₃(PO₄)₂) and phosphor oxide (P₂O₅) phases.

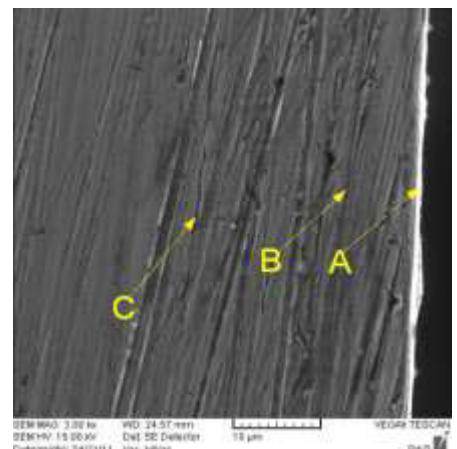
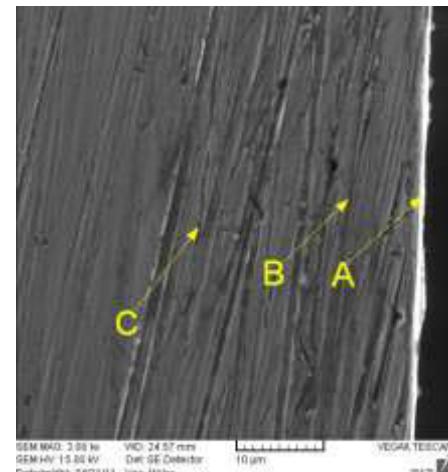
**a****b**
Fig.3

Photo of cross sectional SEM micrograph of the Ni-P deposit (a) before and (b) after radiation.

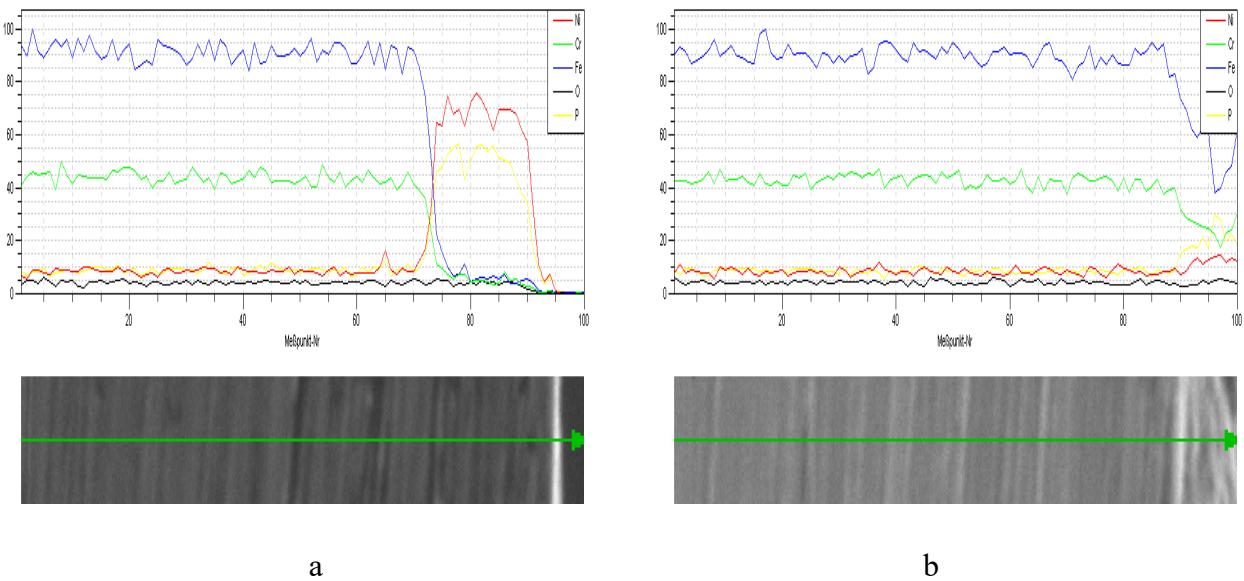


Fig.4

Line scans analyses of the Ni-P deposit (a) before and (b) after oxidation

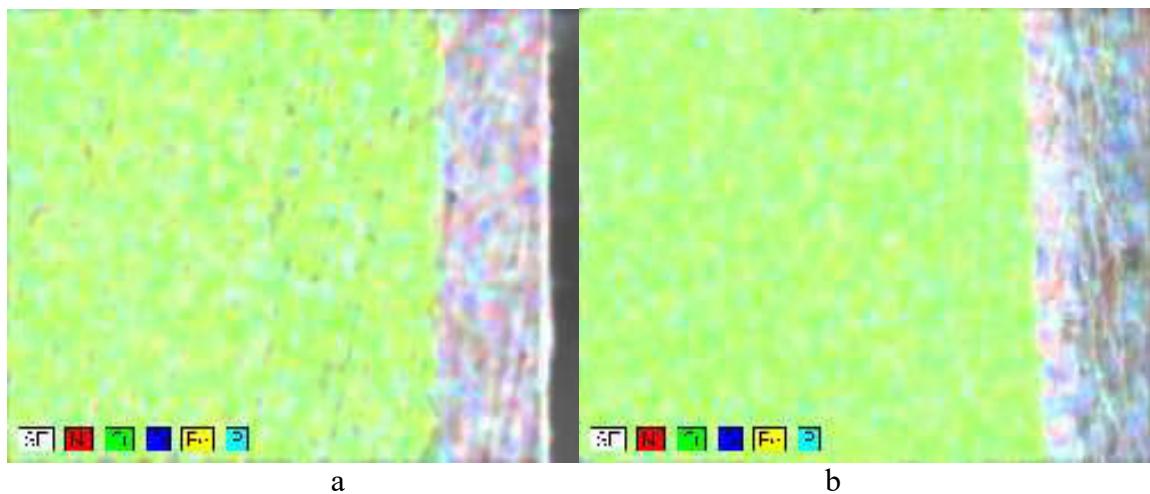


Fig.5

Map scans analysis of the Ni-P deposit (a) before and (b) after radiation

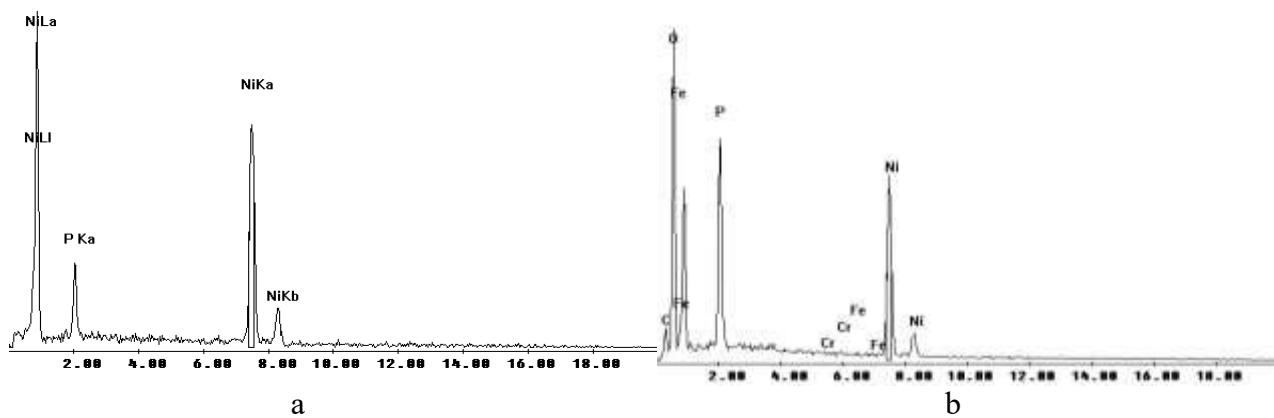
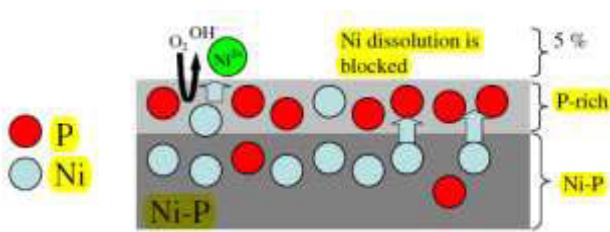


Fig.6

EDX pattern of the electroless Ni-P deposit before and after oxidation

**Fig.7**

Schematic models for chemical passivation of Ni-P deposits during corrosion in H_2O_2 solution

CONCLUSION

These results suggest the following conclusions: The high corrosion resistance to electroless deposited Ni-P alloys can be explained by a strong enrichment of elemental phosphorus at the interface, which limits the dissolution of nickel via a diffusion mechanism and finally formation of P_2O_5 oxide at surface layer. This layer accounts for the diffusion con-

trolled dissolution of the alloy. Thus, it was clearly shown that the corrosion behavior of the EN specimens was predominantly influenced by the morphological and surface compositional aspects of the deposits also. This investigation found that oxidation H_2O_2 with gamma radiation had considerable effect on the electrolysis Ni-P deposit. Gamma radiation of electroless Ni-P deposits in 30% H_2O_2 environment caused completely fragmentation the Ni-P deposit. This most probably was due to oxidation of Ni-P deposit in H_2O_2 environment during gamma radiation. Expansion of Ni-P deposit followed by preferential formation of P_2O_5 oxide during gamma radiation caused formation of intensive residual stress in the structure of Ni-P deposit, which leads to fragmentation of deposit after gamma radiation.

1. T.S.N.Sankara Narayanan, KKrishnaveni, S.K.Seshadri. *Electroless Ni-P/Ni-P duplex coatings: preparation and evaluation of microhardness, wear and corrosion resistance*, *Materials Chemistry and Physics*, **82** (2003) 771-779.
2. Wolfgang Riedel. *Electroless Nickel plating*, ASM International, Finishing Publications Ltd., (1991) 1-47.
3. Ji Hyun Kim, Il Soon Hwang. *Electroless nickel-plating for the PWSCC mitigation of nickel-base alloys in nuclear power plants*, *Nuclear Engineering and Design*, **238** (2008) 2529-2535.
4. H.Ocken, C.Lin, D.H.Lister, *Thin films to impede the incorporation of radionuclides in austenitic stainless steels*, *Thin Solid Films*, **171** (1989) 323-334.
5. Robert E.Donaghy, Anna H.Sherman, *Electroless Deposition process for Zirconium and Zirconium alloys*, United States Patent, 4284660.
6. B.Pastina, J.Isabey, B.Hickel. *The influence of water chemistry on the radiolysis of the primary coolant water in pressurized water reactors*, *Journal of Nuclear Materials*, **264** (1999) 309-318.
7. M.Y.Hashemi, A.A.Garibov, T.N.Agayev. *Effect of gamma radiation on oxidation of electroless Ni-P deposited on stainless steel 304 surface*, *Engineering and applied Electrochemistry*, **50** (2014) 38-42.
8. M.Wierzbicka, A.Malecki. *The detailed mechanism of oxidation of Ni-P alloys*, *Journal of thermal analysis and calorimetry*, **55**(1999) 981-987.
9. Bernhard Elsener, Maura Crobu, Mariano Andrea Scorcipino, Antonella Rossi. *Electroless deposited Ni-P alloys: corrosion resistance mechanism*, *J. Appl. Electrochem.*, (2008)38: 1053–1060, DOI 10.1007/s10800-008-9573-8.

ИЗУЧЕНИЕ ОКСИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ Ni-P СЛОЯ ПОСЛЕ ОКИСЛЕНИЯ В РАСТВОРЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ГАММА ОБЛУЧЕНИЯ

А.А.ГАРИБОВ, Т.Н.АГАЕВ, М.И.ХАШЕМИ

Изучено влияние окислительной среды пероксида водорода под действием гамма облучения на состав поверхностного слоя Ni-P сплава, созданного на поверхности нержавеющей стали марки 304 при комнатной температуре методами ИК-спектроскопии, ХРД, ПЭМ с ЭДХ. Результаты анализа поверхности и образование

(Ni₃ (PO₄)₂) и P₂O₅ фаз на окисленной поверхности под действием гамма облучения показывают, что окисление Ni-P слоя в водной среде сходно с реакторными условиями и начинается с растворения Ni, что вызывает образование богатого фосфором слоя, предотвращающего дальнейшее окисление Ni. При дальнейшем увеличении концентрации окислителя богатый фосфором слой трансформируется в никель-fosfatную и фосфор-оксидную фазы. Этот слой имеет большую сопротивляемость коррозии и используется для защиты от коррозии структурных материалов реактора.

QAMMA ŞÜALANMANIN TƏSİRİ İLƏ H₂O₂ MÜHİTİNDƏ OKSİDLƏŞMƏDƏN SONRA Ni-P TƏBƏQƏSİNİN SƏTHİNDƏ YARANAN OKSİDLƏRİN TƏDQİQİ

A.A.QƏRİBOV, T.N.AĞAYEV, M.Y.HAŞEMİ

Təqdim olunan tədqiqatda 304 markalı paslanmayan poladın səthində Ni-P ərintisinin təbəqəsi yaradılmış, hidrogen peroksid və qamma-şüaların təsiri nəticəsində həmən təbəqənin otaq temperaturunda tərkibi İQ-spektroskopiya, XRD, SEM üsulları vasitəsilə öyrənilmişdir. Səthin analizinin nəticələri, habelə (Ni₃ (PO₄)₂) və P₂O₅ fazalarının qamma şüalanmanın təsiri ilə oksidləşmiş səthdə yaranması göstərir ki, Ni-P təbəqəsinin su mühitində oksidləşməsi reaktor şəraitinə uyğun gedir və Ni həll olunmasından başlayır ki, bu da fosforla zəngin təbəqənin yaranmasına gətirib çıxarır və son nəticədə Ni oksidləşməsini dayandırır. Oksidləşdiricinin qatılığının artması zamanı fosforla zəngin təbəqə nikel-fosfat və fosfor-oksid fazlarına çevrilir. Bu təbəqə korroziyaya davamlılığı ilə fərqlənir və reaktorların struktur materiallarının korroziyasından müdafiəsi üçün istifadə olunur.

УДК.621.315.592

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОНТАКТОВ ОТОЖЖЕННЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ СО СПЛАВОМ Bi-Sn

Т.Д.АЛИЕВА, Г.Д.АБДИНОВА, Н.М.АХУНДОВА, Д.Ш.АБДИНОВ

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 131
aliyevat@yahoo.com

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

Исследованы электрические свойства контактов отожженных при 473К монокристаллов $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ с эвтектикой мас.%57Bi+43Sn в интервале температур $\sim 77 \div \sim 300\text{K}$. Показано, что указанный сплав с монокристаллами создает омический контакт с достаточно низким контактным сопротивлением. При нанесении эвтектики на торцы кристаллов в контакте происходит образование промежуточных фаз в виде теллуридов висмута и олова, легирование приконтактной области кристалла и заполнение в этой области вакансий в подрешетке олова диффундирующими атомами компонентов контактного сплава.

Ключевые слова: монокристалл, твердый раствор, промежуточная фаза, контактный сплав, контактное сопротивление.

Параметры электронных преобразователей существенно зависят от электронных и физико-химических свойств контакта металл-полупроводник в их структурных элементах. В работах [1-4] исследованы электронные свойства контактов твердых растворов на основе Bi_2Te_3 и PbTe с различными металлическими сплавами. Однако электрические свойства контактов SnTe и твердых растворов на его основе с контактными материалами почти не исследованы, что затрудняет получение структур металл-полупроводник с заданными свойствами с использованием этих материалов.

В данной работе приводятся результаты исследований по электрическим свойствам контактов монокристаллов $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ с эвтектикой (мас.%)57Bi+43Sn в интервале температур $77 \div 300\text{K}$.

Монокристаллы $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ выращивались методом Бриджмена. Длина и диаметр выращенных монокристаллических слитков составляли соответственно ~ 30 и 14mm . Однофазность синтезированного слитка и монокристалличность полученных образцов были подтверждены рентгеноструктурным анализом. Режимы синтеза состава и выращивания мо-

нокристаллов из синтезированного материала, обеспечивающие получение однородных и однофазных кристаллов, были установлены экспериментально. Однородность слитков также проверялась электрическими измерениями (измерением распределения электрического потенциала вдоль слитка). Длина участка однородного по электрическим свойствам слитка достигала $\approx 24\text{-}25\text{ mm}$. Из однородной части слитков монокристаллов на электроискровой установке были вырезаны образцы в виде цилиндра диаметром и высотой ≈ 14 и 13mm соответственно. Удаление нарушенного слоя, образующегося на торцах образцов при резке, осуществлялось химическим травлением. Образцы отжигались в вакууме $\sim 10^{-2}\text{Pa}$ при $\sim 473\text{K}$ в течение 120 часов. Все кристаллы имели р-тип проводимости в интервале $77 \div 300\text{K}$.

Контакты на торцевых поверхностях образцов создавали методом залуживания торцов со сплавом Bi-Sn. Удельное сопротивление контактов и кристаллов измеряли зондовым методом на переменном токе [5].

Измерения вольт-амперной характеристики структур $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ -(мас.%)57Bi+43Sn

показали, что во всех случаях контакты являются омическими.

В Таблице приводятся данные по зависимостям удельного сопротивления контактов r_k и кристаллов ρ от концентрации марганца в кристалле до и после отжига при ~ 473 К.

Таблица

Зависимости удельного сопротивления контакта r_k и кристаллов ρ при ~ 77 К от концентрации марганца в $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$.

x	Неотожженные образцы		Отожженные образцы	
	lgr_k , Ом·см ²	$lg\rho$, Ом·см	lgr_k , Ом·см ²	$lg\rho$, Ом·см
0	-4,14	-3,81	-3,59	-3,48
0,0025	-3,62	-3,40	-4,01	-3,63
0,005	-4,33	-3,80	-4,82	-4,74
0,01	-5,05	-3,59	-6,02	-4,19
0,02	-4,82	-3,84	-5,05	-4,38
0,04	-4,20	-3,38	-3,75	-3,38

На Рис.1 представлены зависимости контактного сопротивления r_k структуры $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ -(мас.%)57Bi+43Sn и удельного сопротивления ρ кристаллов $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ от температуры соответственно. Видно, что во всех случаях с ростом температуры r_k контактов растет и эта зависимость хорошо коррелируется с температурной зависимостью ρ кристаллов.

Соединение SnTe плавится при температуре ~ 1063 К. В области от 273 К до температуры плавления в этом соединении полиморфного превращения не обнаружено. Диаграмма состояния в области близкой к стехиометрии изучена в работах [6-7], где показано, что в системе имеется область гомогенности, лежащая в стороне избытка теллура и имеющая протяженность от 50,1 до 50,9 ат.% теллура. Это приводит к образованию электроактивных вакансий в подрешетке олова, концентрация которых достигает $\sim 10^{21} \text{ см}^{-3}$ [8].

В процессе нанесения расплавленного контактного материала Bi-Sn (и других эвтектик) на торцы кристаллов твердых растворов систем Bi-Sb-Te, Bi-Te-Se, Pb-Mn-Te на границе раздела твердого раствора со сплавом обра-

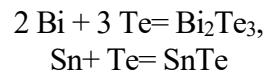
зуется промежуточная фаза в виде теллуридов и селенидов компонентов их сплавов [1-4]. Подобные теллуриды могут образовываться и в случае кристаллов $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. Так как SnTe кристаллизуется с избытком теллура, образование теллуридов компонентов контактного сплава на контакте исследованных структур становится вероятным.

Поэтому при нанесении сплава Bi-Sn на торцы кристаллов $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ может происходить и образование промежуточных фаз за счет взаимодействия атомов Bi и Sn со свободными (избыточными) атомами Te, в кристаллах. Этому способствует то, что энергии Гиббса ΔG^0 реакций Bi+Te и Sn+Te отрицательные.

Расчет энергии Гиббса реакции, вычисленной по соотношению [9]

$$\Delta G^0 = \sum n_i (\Delta H_{i295}^0 - T \Delta S_{i295}^0)_{\text{кон}} - \sum n' (\Delta H_{i295}^0 - T \Delta S_{i295}^0)_{\text{исх}}$$

(где- H_{i295}^0 - изменение энталпии в стандартных условиях, ΔS_{i295}^0 - изменение стандартного значения энтропии) для предполагаемых реакций



отрицательные и соответственно равны $-78,1 \text{ кДж/моль}$ и $-61,9 \text{ кДж/моль}$.

Удельное сопротивление соединения Bi_2Te_3 при ~ 77 К примерно в два раза меньше, чем кристаллов $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. Поэтому образование промежуточной фазы типа Bi_2Te_3 на границе раздела может привести к увеличению r_k .

При нанесении расплавленного контактного сплава на торцы кристаллов $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, за счет диффузии приконтактная область кристалла будет обогащаться атомами компонентов сплава. Как было отмечено выше SnTe и $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ кристаллизуются с избытком теллура, что обуславливает наличие в них большого количества ($\sim 10^{21} \text{ см}^{-3}$) электрически активных вакансий в подрешетке олова. Можно предполагать, что атомы олова и висмута,

являющиеся компонентами контактного сплава Bi–Sn, диффундируя в приконтактную область кристалла $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, в процессе нанесения контакта располагаются в указанных

вакансиях подрешетки олова и, тем самым, уменьшают концентрацию дырок (основных носителей тока) в этой области.

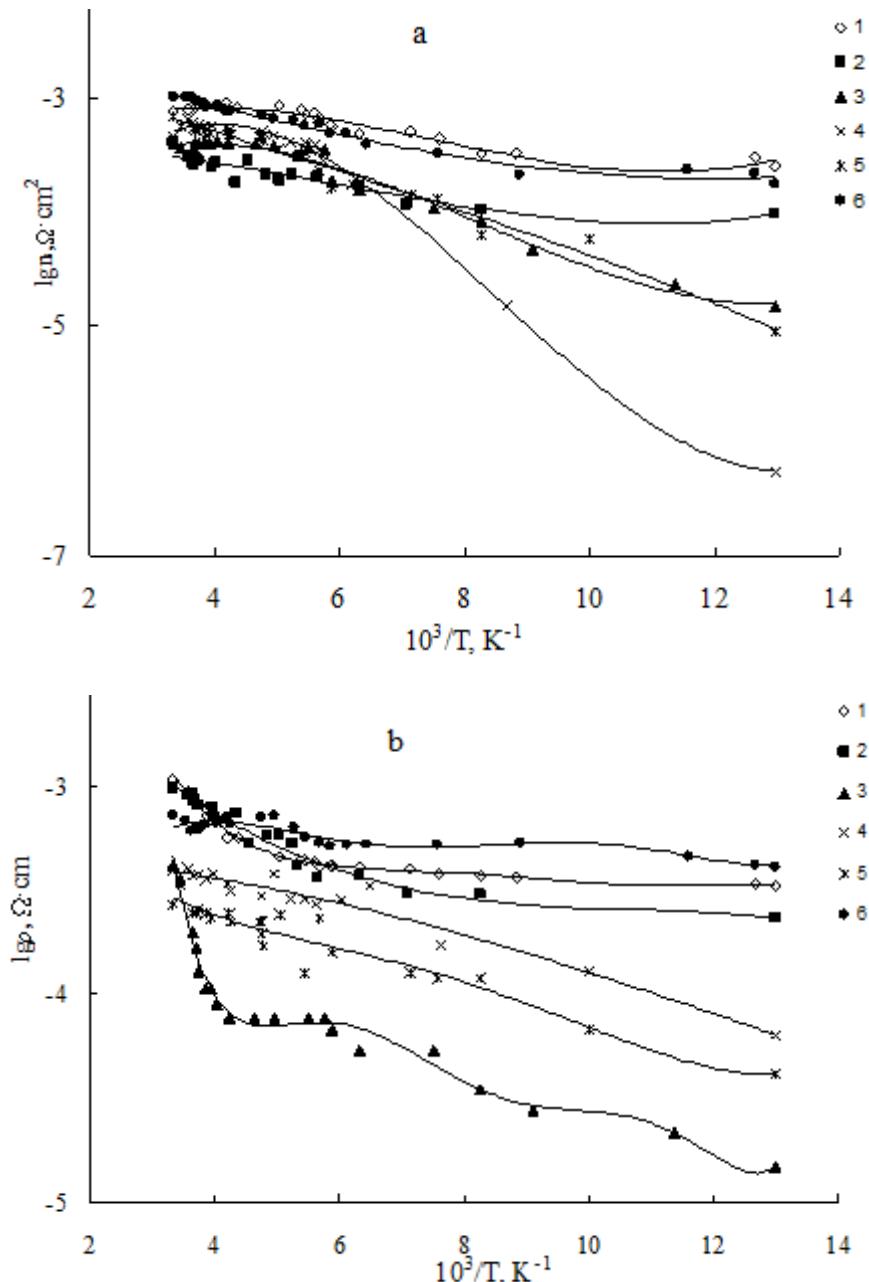


Рис.1

Зависимости удельного электросопротивления контактов монокристаллов $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ со сплавом (мас.%) 57Bi+43Sn (а) и удельного электросопротивления монокристаллов $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ (б) от температуры. Кривые 1-6 относятся к $x=0; 0,0025; 0,005; 0,01; 0,02; 0,04$, соответственно.

Высота потенциального барьера $\Delta\varphi$ на границе раздела контактный материал- $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, возникающая за счет разности положений уровней Ферми кристаллов и контактного материала и глубина проникновения поля (l) в приконтактную область теллурида олова в контакте определяются соответственно выражениями

$$\Delta\varphi = (A_1 - A_2)/e,$$

$$l = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(A_1 - A_2)}{e^2 n_0}}$$

где, в нашем случае, A_1 и A_2 – работа выхода электронов для кристаллов $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ и контактного сплава, соответственно, e - заряд электрона, n_0 – концентрация основных носителей тока (дырок) в кристалле, ε_0 - диэлектрическая постоянная, ε - диэлектрическая проницаемость материала.

Таким образом, диффузия атомов Sn и Bi в приконтактную область кристалла, приводящая к уменьшению в этой области концентрации дырок, также приводит и к росту контактного сопротивления в исследованных структурах.

Контактное сопротивление для исследованных нами структур в интервале температур 77÷300К возрастает с ростом температуры. Такая зависимость r_k не соответствует механизмам протекания тока термоэлектронной и полевой эмиссии. Поэтому можно сделать предположение, что омический контакт связан с металлическими шунтами [10], представляющими собой атомы висмута, осажденные по линиям несовершенств кристалла $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. В этом случае сопротивление контакта определяется выражением [10]

$$r_k = \frac{(\rho_0 + \alpha T)l}{\pi d^2 K}$$

где ρ_0 – удельное сопротивление металла при $T \rightarrow 0\text{K}$, α - температурный коэффициент удельного сопротивления, l -ширина слоя объемного заряда, d -атомный радиус металла, K -плотность несовершенств, на которых могут осаждаться атомы металла.

Значения r_k при $\sim 77\text{K}$ в исследованных структурах меняются в пределах $\sim 10^4\text{-}10^6 \text{ Ом}\cdot\text{см}^2$. Согласно расчетам, проведенным в [10], при

низких плотностях несовершенств ($\leq 10^6 \text{ см}^{-3}$), механизм протекания тока по металлическим шунтам является несущественным ($r_k \geq 10^{-1} \text{ Ом}\cdot\text{см}^2$), а при высоких плотностях несовершенств ($> 10^8\text{-}10^9 \text{ см}^{-3}$), протекание тока, связанное с металлическими шунтами, может стать определяющим. В сплавных контактах к полупроводникам с достаточно низкой плотностью дислокаций механизм шунтирования также может оказаться существенным, так как при вплавлении металла в полупроводник, плотность несовершенств, в частности, дислокаций в приконтактной области сильно увеличивается из-за различия в постоянных решетки контактирующих материалов.

Некоторый же рост удельного сопротивления образцов $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ по сравнению с SnTe , а также контактного сопротивления при больших концентрациях марганца объясняется дефектностью структуры и сложностью структуры валентной зоны этих кристаллов. Принимается, что малые концентрации марганца, распределяясь в кристаллах как примесные атомы, приводят к росту концентрации дырок и, соответственно, электропроводности. При концентрациях марганца больше $x=0,005$ происходит замещение ими атомов олова в кристаллах. Так как исследованные кристаллы кристаллизуются с вакансиями в подрешетке олова, введенные атомы Mn при больших концентрациях, в первую очередь, будут размещаться в этих вакансиях, это приведет к уменьшению концентрации вакансий, т.е. концентрации основных носителей тока (дырок) и росту ρ и контактного сопротивления r_k . Как и в случае $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ [11] в $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ с ростом концентрации Mn зона легких дырок приближается к зоне тяжелых дырок. Поэтому с ростом концентрации марганца в составе $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ вклад тяжелых дырок в электропроводность растет. Это также приводит к росту удельного сопротивления кристаллов и контактного сопротивления.

Уменьшение r_k и ρ после отжига для образцов, содержащих Mn, обусловлено тем, что при отжиге происходит более равномерное распределение атомов Mn как примесей в объеме кристаллов.

Таким образом, полученные данные показывают, что на границе раздела монокристаллов со сплавом Bi-Sn образуются достаточно низкоомные омические контакты, электрические свойства которых определяются, в основном, концентрацией дырок в кристаллах, образованием промежуточных фаз типа теллуридов висмута и олова на границе раздела

1. Т.Д.Алиева, Г.Дж.Абдинова, Н.М.Ахундова, Д.Ш.Абдинов. Адгезионные и электрические свойства границы раздела кристаллов $Pb_{1-x}Mn_xTe$ со сплавом In-Ag-Au, *ЖФХ*, **82** (2008) 2185-2186.
2. Т.Д.Алиева, Д.Ш.Абдинов. Физико-химические и электрические явления на границе раздела кристаллов твердых растворов систем $Bi_2Te_3-Sb_2Te_3$, $Bi_2Te_3-Bi_2Se_3$ с контактными материалами, *Неорган. материалы*, **33** (1997) 27-38.
3. Б.Ш.Бархалов, Н.М.Ахундова, Д.Ш.Абдинов. Исследование границ раздела твердых растворов систем $Bi_2Te_3-Sb_2Te_3$, $Bi_2Te_3-Bi_2Se_3$ и сплавов систем $Bi-Pb-Sn-Cd$, $Bi-Pb-Sn$, $Bi-Sn$, *Неорган.материалы*, **26** (1990) 1427-1431.
4. Т.Д.Алиева, Г.Дж.Абдинова, Н.М.Ахундова, Р.А.Исмайилова. Физико-химические процессы на границе раздела некоторых полупроводниковых твердых растворов с контактными сплавами, *ЖФХ*, **83** (2009) 2336-2338.
5. Т.Д.Алиева, Г.Дж.Абдинова, Н.М.Ахундова, С.З.Джафарова. Механизм протекания тока в контакте (In-Ag-Au)- $Pb_{1-x}Mn_xTe$. *Transactions of National Academy of Sciences of Azerbaijan, Series of Physics-Mathematical and Technical Sciences, Physics and Asronomy*, **XXXI** № 2 (2011) 126-130.
6. Л.Е.Шелимова, Н.Х.Абрикосов. Система $Sn-Te$ в области соединения $SnTe$, *ЖНХ*, **8** (1964) 1879-1882.
7. Н.Х.Абрикосов В.Ф.Баукина, Л.В.Перецкая. Полупроводниковые соединения, их получение и свойства. М. Наука, (1967) 176.
8. M.R.Lorens, D.M.Yepsen. An Explanation of high cftion vacancy concentration and p-type conductivity in semiconductors containing a multivalent metal in its lowest valence state, *J. Phys.Chem.Solids*, **26** (1965) 1177-1179.
9. Б.Ф.Ормонт. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников, М. Высш. Школа, (1973) 656.
10. Т.В.Бланк, Ю.А.Гольдберг. Механизмы протекания тока в омических контактах металл—полупроводник, *ФТП*, **41** (2007) 1281-1309.
11. Г.З.Багиева, Г.Д.Абдинова, Н.Б.Мустафаев, Д.Ш.Абдинов. Влияние отжига на электрические свойства монокристаллов $Pb_{1-x}Mn_xTe$ с избытком теллура, *ФТП*, **48** (2014) 149-151.

криSTALLов $Sn_{1-x}Mn_xTe$ с контактным сплавом, диффузией компонентов сплава в приконтактную область кристалла, заканчивающейся заполнением электроактивных вакансий в подрешетке олова и образованием в приконтактной области металлических шунтов, пронизывающих слой объемного заряда.

Azerbaijan, Series of Physics-Mathematical and Technical Sciences, Physics and Asronomy, XXXI № 2 (2011) 126-130.

6. Л.Е.Шелимова, Н.Х.Абрикосов. Система $Sn-Te$ в области соединения $SnTe$, *ЖНХ*, **8** (1964) 1879-1882.
7. Н.Х.Абрикосов В.Ф.Баукина, Л.В.Перецкая. Полупроводниковые соединения, их получение и свойства. М. Наука, (1967) 176.
8. M.R.Lorens, D.M.Yepsen. An Explanation of high cftion vacancy concentration and p-type conductivity in semiconductors containing a multivalent metal in its lowest valence state, *J. Phys.Chem.Solids*, **26** (1965) 1177-1179.
9. Б.Ф.Ормонт. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников, М. Высш. Школа, (1973) 656.
10. Т.В.Бланк, Ю.А.Гольдберг. Механизмы протекания тока в омических контактах металл—полупроводник, *ФТП*, **41** (2007) 1281-1309.
11. Г.З.Багиева, Г.Д.Абдинова, Н.Б.Мустафаев, Д.Ш.Абдинов. Влияние отжига на электрические свойства монокристаллов $Pb_{1-x}Mn_xTe$ с избытком теллура, *ФТП*, **48** (2014) 149-151.

**TERMİK İŞLƏNMƏ KEÇMİŞ $Sn_{1-x}Mn_xTe$ MONOKRİSTALLARININ Bi-Sn
ƏRİNTİSİ İLƏ KONTAKTİNİN ELEKTRİK XASSƏLƏRİ**
T.C.ƏLİYEVA, G.C.ABDİNOVA, N.M.AXUNDOVA, C.Ş.ABDİNOV

~473K-da termik işlənmə keçmiş $Sn_{1-x}Mn_xTe$ monokristallarının (kütl.%57Bi+43 Sn evtektikası ilə kontaktının ~77±300K intervalında elektrik xassələri tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, göstərilən ərinti monokristalla kifayət qədər aşağı müqaviməti omik kontakt yaradır. Evtektikanı kristalın səthində çəkərkən kontaktda bismut və qalay telluridləri şəklində aralıq faza yaranır, kristalın kontaktyanı hissəsi ərintinin komponentləri ilə legirlənir və bu hissədə qəfsəlti qalay vakansiyaları həmin komponent atomları ilə qismən dolar.

ELECTRICAL PROPERTIES CONTACT ANNEALED SINGLE CRYSTALS $Sn_{1-x}Mn_xTe$ ALLOYED Bi-Sn
T.D.ALIEVA, G.D.ABDINOVA, N.M.AKHUNDOVA, D.SH.ABDINOV

The electrical properties of the contacts annealed at 473K, $Sn_{1-x}Mn_xTe$ eutectic wt.%57Bi+43Sn in the temperature range 77±300K have been researched. It has been shown that this alloy single crystals created an ohmic contact with a sufficiently low contact resistance. When the eutectic has been coated to the ends of crystals there has been formed the intermediate phases consisted from bismuth tellurides and tin doping of the contact region of the crystal and the filling of vacancies in this area in the sublattice of tin atoms diffusing components of the contact alloy.

Редактор: проф. Г.Аждаров

УДК 537.226.2; 537.226.3

ВЛИЯНИЕ ПРИЭЛЕКТРОДНОГО ЗАЗОРА НА ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ В ЦЕОЛИТЕ

В.И.ОРБУХ¹, Г.М.ЭЙВАЗОВА¹, Н.Н.ЛЕБЕДЕВА¹, М.Б. МУРАДОВ¹, Б.Г.САЛАМОВ^{2,3}

Бакинский Государственный Университет¹

AZ1148 Баку, ул. З.Халилова 23

Department of Physics, Faculty of Sciences²

Gazi University, 06500 Ankara, Turkey

Институт Физики НАН Азербайджана³

Баку, AZ1143, пр. Г.Джавида, 131

orbukh@rambler.ru

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

Измерены диэлектрические спектры трёх видов цеолита с различной проводимостью. Установлено, что имеют место два факта, не укладывающиеся в обычные представления. Во-первых, аномально большие (до тысячи) значения диэлектрической проницаемости. Во-вторых, чёткая зависимость между диэлектрической проницаемостью и проводимостью: образцы с большей проводимостью демонстрируют большую диэлектрическую проницаемость. Предложена модель неоднородной структуры, которая объясняет наблюдаемые явления.

Ключевые слова: цеолит, ионы серебра, диэлектрическая проницаемость

ВВЕДЕНИЕ

Цеолиты – водные алюмосиликаты, бесконечный алюмосиликатный каркас которых образуется при сочленении через общие вершины тетраэдров $[SiO_4]^{4-}$ и $[AlO_4]^{5-}$, имеющих сообщающиеся между собой полости, занятые большими ионами и молекулами воды [1]. Слабосвязанные катионы и молекулы воды в порах цеолитов характеризуются значительной подвижностью, что обеспечивает возможность ионного обмена и обратимости дегидратации, причем не оказывая влияния на алюмосиликатный жесткий каркас. Благодаря этому свойству цеолиты имеют необычайно широкую сферу использования в промышленности и сельском хозяйстве.

В настоящее время известны более 45 видов природных цеолитов, из которых наиболее распространенными являются клиноптилолит, гейландит, филлипсит, ломонит, морденит, эрионит, шабазит, феррьеит,

анальцим. Клиноптилолит определяется как серия цеолитовых минералов, имеющих четкую структурную топологию гейландита (HEU).

Структурная топология тетраэдрической HEU решетки достаточно исследована и имеет C2/m симметрию со сплющенными каналами, ограниченными десятичленными ($7.5 \times 3.1 \text{ \AA}$) и восьмичленными тетраэдрическими кольцами ($4.6 \times 3.6 \text{ \AA}$), параллельными осями C. Добавочные восьмичленные кольцевые каналы ($4.7 \times 2.8 \text{ \AA}$) параллельны [100] и [102] и пересекаются с предшествующими каналами в пределах [010], образуя систему из двумерных параллельных каналов к [010], которые ответственны за слоистую структуру [1,2].

Анализ данных по структуре и свойствам позволяет рассматривать этот цеолит не только как перспективный сорбент, но и как объект, на котором можно исследовать пороэмиссию электронов, размножение электронов и газовый разряд в порах [3], диэлектрические и электрические свойства [4]. Если сорбцион-

ные свойства цеолита определяются размерами и конфигурацией пор, то его электрические свойства определяются составом вещества в поровом пространстве [5]. На основе рентгенографического и спектрального химического анализа нами установлена принадлежность исследуемого нами природного цеолита к высококремнеземным цеолитам типа клиноптилолит [6]. Содержимое каналов представляет собой внекаркасную подсистему - это положительно заряженные ионы-катионы Na^+ , K^+ , Mg^+ , Ca^+ , компенсирующие отрицательный заряд каркаса, а также большое количество молекул H_2O -координационной воды. Вода играет важную роль для обеспечения стабильности каркаса клиноптилолита и, как полагают [7], приводит к увеличению подвижности ионов в поровом пространстве. Слабосвязанные катионы и молекулы воды в порах цеолитов приводят к большим значениям диэлектрической проницаемости на низких частотах и существенной зависимости электрофизических свойств цеолитов от частоты и температуры [8]. Способность катионов диффундировать сквозь большую открытую цеолитовую структуру дает возможность получения высокой ионной проводимости в цеолитах. За последние годы сделано немало попыток исследования факторов, которые управляют ионным транспортом во внешнем электрическом поле [9]. Эти исследования сфокусированы, главным образом, на влиянии температуры, степени гидратации, природы металлических катионов на проводимость, измеряемую на переменном напряжении.

В настоящей работе мы представляем частотные зависимости диэлектрической проницаемости в цеолите (клиноптилолите) с разным составом вещества в поровом пространстве, что приводит к разной проводимости и предлагаем модель для объяснения.

ЭКСПЕРИМЕНТ

В качестве объекта исследования был выбран клиноптилолит: сингония - моноклинная, пространственная группа симметрии $\text{C}2/\text{m}$. Параметры элементарной ячейки по данным рентгеноструктурного анализа:

$\text{a}=1.761\text{nm}$, $\text{b}=1.780\text{nm}$, $\text{c}=0.741\text{nm}$, $\beta=115,2^\circ$. Для эксперимента из моноблока цеолита вырезалась плоскопараллельная пластина, из которой нарезались образцы в виде таблеток размером: толщина $2.3 \times 10^{-3}\text{m}$, площадь большой грани $s=18.75 \times 10^{-6}\text{m}^2$. Электроды были прижимными отполированными металлическими дисками: анод из нержавеющей стали, катод - из латуни.

Для модификации ионами серебра применялся ионообменный метод: I этап - это ионозамещение ионов натрия на ионы серебра, когда пластина цеолита погружалась на сутки в 1М раствор азотнокислого серебра, затем промывалась в дистиллированной воде и высушивалась при 100°C ; II этап - это химическое восстановление ионов серебра до наночастиц серебра, когда пластина цеолита с ионами серебра помещается на 40сек в раствор боргидрата натрия (NaBH_4). Таким образом, мы получаем образцы цеолита с разным содержанием ионов серебра.

МЕТОД ИЗМЕРЕНИЯ

Электрические свойства полученных образцов измеряли методом импедансной спектроскопии. Образцы помещались между двумя плоскими отполированными металлическими прижимными электродами сэндвич геометрии на входе к прибору МНИПИ Е7-20 (измеритель имметанса LRC, в диапазоне частот $200\text{Гц} \div 1\text{МГц}$). Измерения проводились при комнатной температуре, при атмосферном давлении и влажности воздуха 0,85%. Толщина пластины природного цеолита, модифицированного ионами серебра и цеолита с частиенно нейтрализованными ионами серебра были, соответственно, 1,95см, 2,92см и 2,1см, а диаметр контакта был 0,5см.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Присутствие в модифицированном цеолите ионов серебра проявляется при сравнении сопротивления натурального и модифицированного цеолита на низкой частоте (500Гц): сопротивление модифицированного образца в 100 раз меньше (для природного цеолита 400Мом, для модифицированного ионами се-

ребра цеолита 3,6Мом и для частично нейтрализованного цеолита 17Мом).

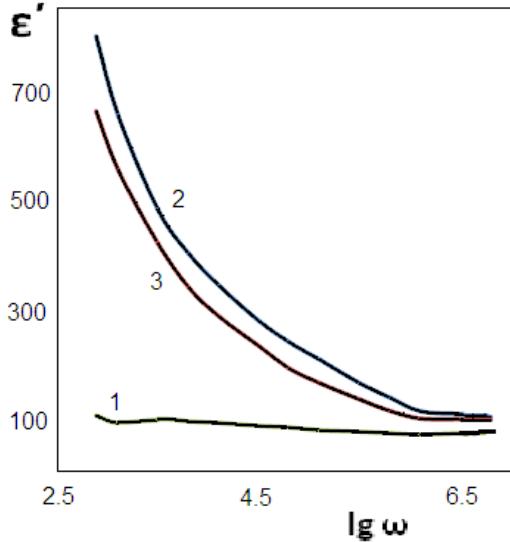


Рис.1

Зависимости проницаемости природного цеолита (1), цеолита модифицированного ионами серебра (2) и модифицированного цеолита с частично нейтрализованными ионами серебра (3)

Полное комплексное сопротивление структуры цеолит-зазор имеет вид:

$$R = \frac{d_1}{s} \frac{1}{\sigma + i\omega\epsilon_0\epsilon_1} + \frac{d_2}{s} \frac{1}{i\omega\epsilon_0\epsilon_2}, \quad (1)$$

первое слагаемое - это комплексное сопротивление цеолита, а второе - зазора, так как они соединены последовательно, то общее сопротивление равно сумме сопротивлений. Из соотношения между комплексным сопротивлением и диэлектрической проницаемостью

$$\epsilon = Im \frac{d_1 + d_2}{i\omega SR} \quad (2)$$

с учётом (1) получаем:

$$\epsilon = \epsilon_2 \frac{d_1 + d_2}{d_2} \frac{1 + (\omega\tau)^2 x(1+x)}{1 + (\omega\tau)^2 (1+x)^2}, \quad (3)$$

$$x = \frac{\epsilon_1 d_2}{\epsilon_2 d_1}, \quad (4)$$

здесь $\tau = \frac{d_1 \epsilon_2}{d_2 \sigma}$ - максвелловское время.

Из анализа (3) определяем пределы изменения диэлектрической проницаемости в зависимости от частоты:

$$\epsilon_2 \frac{d_1 + d_2}{d_2} \frac{1}{1 + \frac{\epsilon_2 d_1}{\epsilon_1 d_2}} < \epsilon < \epsilon_2 \frac{d_1 + d_2}{d_2}, \quad (5)$$

левая сторона этого неравенства - предельное значение диэлектрической проницаемости при высоких частотах, правая - для низких частот. В предельном случае, когда $d_2 \ll d_1$ (5) принимает вид:

$$\epsilon_1 < \epsilon < \epsilon_2 \frac{d_1}{d_2}. \quad (6)$$

Именно таким образом малость толщины зазора по сравнению с толщиной образца, объясняет наблюдаемую аномально большую диэлектрическую проницаемость. Физический механизм такого явления заключается в следующем. Если период внешнего электрического поля существенно больше, чем максвелловское время, то поле успевает вытесняться из объёма образца в зазор, емкость которого велика из-за малой его толщины. В противоположном случае, когда период внешнего поля существенно меньше максвелловского времени, поле не успевает вытесняться в зазор, поэтому измеряемая емкость есть последовательно соединённые малая емкость образца и большая емкость зазора. В этом случае общая ёмкость определяется меньшей из них.

Из (5) следует, что отношение наибольшего к наименьшему значению измеряемой диэлектрической проницаемости:

$$\frac{\epsilon_{\max}}{\epsilon_{\min}} = 1 + \frac{\epsilon_2 d_1}{\epsilon_1 d_2}. \quad (7)$$

Если не учитывать разницу в диэлектрических проницаемостях, то уже при толщине диэлектрического слоя на порядок меньше получается наблюдаемое изменение диэлектрической проницаемости. (3) также объясняет увеличение диэлектрической проницаемости с ростом проводимости. Дело в том, что (3) убывающая функция от $\tau = \frac{d_1 \epsilon_2}{d_2 \sigma}$, а эта функция

обратна пропорциональна проводимости. Отсюда следует, что реальная часть диэлектрической проницаемости возрастающая функция проводимости.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в рамках простой двухслойной модели удалось объяснить наблюдаемое аномально большое значение диэлектрической проницаемости. Оказалось, что аномалии никакой нет, просто при низких частотах отклик определяется узким диэлектрическим слоем. Но большая ёмкость этого слоя есть следствие его малой толщины, а не аномально большой диэлектрической проницаемости. Это явление хорошо известно в полупроводниках, когда при измерении диэлектрической проницаемости на частотах меньших обратного максвелловского времени фактически изменяется диэлектрическая проницаемость приэлектродного слоя. Мы обнаружили это явле-

ние в ионном материале только благодаря очень большой проводимости цеолита модифицированного серебром. Что касается влияния проводимости цеолита на измеряемую емкость слоя, то оно связано с более эффективной перекачкой поля от цеолита на узкий диэлектрический зазор цеолита. Понятно, что изложенные соображения следует учитывать при интерпретации результатов исследований диэлектрических спектров. Хотя все (перекачка поля из низкоомных областей структуры в высокомоментные) может реализовываться и в другом виде. Например, высокомоментные области могут реализоваться в виде пустот между кристаллитами цеолита, которые выполняют роль низкоомных компонентов.

1. G. Gottardi, E.Galli, *Natural Zeolites*. Berlin: Springer-Verlag, (1985) 409.
2. Ch.Baerlocher, W.M.Meier, D.H. Olson, *Atlas of Zeolite framework Types, Revised*. Amsterdam: Elsevier, (2007) 405.
3. Н.Н.Лебедева, В.И.Орбух, Ч.А.Султанов. Газоразрядная система с цеолитовым электродом, *ЖТФ*, **80** (2010) 134-137.
4. С.Ш.Сулейман, А.А.Саакян, С.Никогосян, С.А.Юнусова. Диэлектрические свойства натуральных цеолитов, *Вестн. Рос. Ун. Дружбы Народов*, 1-2 и 3-4 (2007) 147-154 и 155-161
5. В.Н.Богомолов. Жидкости в ультратонких каналах (нитяные и кластерные кристаллы) *УФН*, **124** (1978) 171-182.
6. T.Z.Kuliyeva, N.N.Lebedeva, V.I.Orbukh, Ch.A.Sultanov, *Natural Zeolit-Klinoptilolit Identification, Fizika*, **15** 3 (2009) 43-45.
7. В.В.Юрков, С.В.Лангин, С.В.Барышников, Л.Г.Колесникова, А.И. Регулина, А.Б.Серов, Цеолиты Амурской области, *Минеральные ресурсы, Вестник ДВО РАН*, 1 (2004) 69-79.
8. J.M.Kalogeras, Vassilikou-Dova, *Molecular, Mobility in Microporous Architectures: Conductivity and Dielectric Relaxation Phenomena in Natural and Synthetic Zeolites*, *Cryst.Res.Technol.*, 31 (1966) 693
9. В.Л.Вейсман, В.Н.Марков, Л.И.Николаева, С.В.Панькова, В.Г.Соловьев. Проводимость монокристаллов цеолитов, *ФТТ*, **35** (1993) 1390-1393

ELEKTROD BOŞLUĞUNUN SEOLİTİN DIELEKTRİK NÜFUZLUĞUNUN QIYMƏTİNƏ TƏSİRİ

V. İ. ORBUX, Q. M. EYVAZOVA, M. B. MURADOV, N. N. LEBEDEVA, B.G.SALAMOV

Müxtəlif keçiriciliyi olan üç növ seolitin dielektrik xassələri tədqiq edilmişdir. Adı təsəvvürümüzə uyğun olmayan iki fakt aşkar edilmişdir. Birincisi dielektrik nüfuzluğunun qiymətinin anomal böyük (1000-ə qədər) olmasıdır. İkincisi dielektrik nüfuzluğu və keçiricilik arasında dəqiq asılılığın olmasına: böyük keçiriciliyə malik nümunələr böyük dielektrik nüfuzluğuna malikdir. Müşahidə olunan effektləri izah edən qeyri-bircins struktur üçün model təklif edilmişdir.

THE INFLUENCE OF ELECTRODE GAP ON THE DIELECTRIC CONSTANT OF THE ZEOLITE

V.I.ORBUKH, G.M.EYVAZOVA, N.N.LEBEDEVA, M.B.MURADOV, B.G.SALAMOV

Dielectric spectra of three kinds of zeolite with different conductivity have been measured. It has been found that there were two facts that haven't fit with the usual presentation. Firstly, it has been anomalously large values of the real part of the dielectric permittivity. Secondly, it has been a clear relationship between the dielectric permittivity and conductivity: samples of higher conductivity exhibit high dielectric constant. We have suggested a model of an inhomogeneous structure, which explains the observed phenomena.

Редактор: проф. М.Курбанов

УДК 541. 183. 539. 104

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В НАНО-ДИОКСИДЕ ЦИРКОНИЯ

А.А.ГАРИБОВ, Т.Н.АГАЕВ, Г.Т.ИМАНОВА, И.А.МАМЕДЬЯРОВА

Институт радиационных проблем НАН Азербайджана

AZ1143, Баку, ул. Б. Вахабзаде, 9

agayevteymur@rambler.ru

gunel_ismayilova@rambler.ru

Получена: 18.05.2015

Принята к печати: 22.06.2015

Ключевые слова: ДТА, диоксид циркония, энталпия, теплоемкость.

РЕФЕРАТ

В интервале температур $T=1200\text{--}2800\text{K}$ измерена энталпия диоксида циркония. В исследуемом интервале температур обнаружено два полиморфных превращения в ZrO_2 . Определены значения низкотемпературной и высокотемпературной теплот полиморфных превращений, энталпии превращения моноклинной модификации в тетрагональную и тетрагональной в кубическую.

Диоксид циркония обладает хорошими прочностными, теплоизоляционными и диэлектрическими свойствами в широком интервале температур, что позволяет рассматривать его в качестве перспективного материала как для производства конструкционных материалов, так и для применения в микроэлектронике. Однако сильная зависимость коэффициента линейного расширения материала от температуры, связанная с полиморфностью ZrO_2 (моноклинная фаза стабильна ниже 1170°C , тетрагональная - от 1170 до 2370°C , кубическая - выше 2370°C), значительно ограничивает его применение. Кроме того, циркониевые сплавы нашли широкое применение в ядерной энергетике в качестве конструкционных материалов для тепловыделяющих элементов, чехлов, канальных труб и других компонентов тепловыделяющих сборок [1].

Известно, что наноразмерные порошки диоксида циркония находят применение в различных технических изделиях. Одними из таких изделий являются и топливные ячейки - устройства, служащие для преобразования тепловой энергии в электрическую энергию. Топливные ячейки работают при достаточно высоких температурах, и чтобы обеспечить их

высокое качество и используют наноразмерные порошки, в частности диоксид циркония (ZrO_2). Однако при использовании ZrO_2 в качестве компонента конструкционного материала необходимо учитывать наличие фазовых переходов при высоких температурах.

Целью данной работы было расширение области применения диоксида циркония, что требует более детального изучения термодинамических свойств и фазовых превращений в диоксиде циркония, а также уточнения имеющихся литературных данных по калориметрическим свойствам.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Исследования проводились в статических условиях в специальных кварцевых ампулах объемом $V=1.0\text{cm}^3$ [2,8,10]. В качестве объекта исследования брали образцы диоксида циркония размером частиц $20\text{--}30\text{nm}$. Состав образцов изучен на атомно-абсорбционном спектрометре AA 300 (Perkin Elmer). Состав исследованного диоксида циркония приведены в Таблице 1.

Диоксид циркония - тугоплавкое соединение с преимущественно ионной межатомной связью, существующее в трех кри-

сталлических модификациях: кубической, тетрагональной и моноклинной. Высокая прочность и трещинностойкость диоксида циркония обусловлены полиморфным превращением метастабильной тетрагональной модификации в стабильную моноклинную.

Таблица 1

Элемент	ZrO	Fe	Si	O	Li	Ti	K
Состав, масс.%	99,9	0,01	<0,004	0,03	0,0001	0,0042	0,003

Высокое значение коэффициента термического расширения (КТР) благоприятствует сочленению деталей из диоксида циркония с металлическими и стальными деталями, имеющими близкие значения КТР.

Рентгенографический анализ является начальной стадией рентгеноструктурного, что позволяет делать выводы о физико-химических параметрах данного соединения. Рентгеноструктурный анализ определяет параметры кристаллической решетки, ее структуру и симметрию. Основным методами изучения полученных кристаллов были метод Лауз и Вайзенберга. Главным преимуществом первого является определение ориентации кристалла. Методом вращения определяли параметры кристалла. Метод Вайзенберга позволяет точно определить параметры и симметрию кристаллической решетки. Применяя последовательно методы Лауз и Вайзенберга были определены кристаллические постоянные полученного соединения. Рентгенофазный анализ образцов проводили на дифрактометре D8ADVANCE (Германия). Рабочий режим – 40кв, 40mA, CuK₂ облучение, $\lambda=1,5406\text{ \AA}$, $0,5^\circ < 2\theta < 80^\circ$, T=300К. После термической обработки образцов они вновь перемешиваются до однородного состояния и помещаются в кювету аппарата. Во всех образцах использовались одинаковые условия и режимы. Термический анализ является одним из самых удобных методов определения фазовых переходов. Исследования проводились на установке “Perkin Elmer” STA

6000. Примененная методика позволяет определить потерю массы и фазовые переходы первого типа. Последовательность работ следующая:

- дистиллированная вода, добавленная в анализатор «PolyScience» для поддержания температуры, охлаждается до температуры 16°C с помощью цифровой системы;
- оператор на своем компьютере входит в программу «Pyris Manager» и в окне «PyrisSeries-STA6000 COM-1» создает связь между аппаратом и компьютером;
- для отвода продуктов горения из системы надо обеспечить бесперебойное движение аргона в системе со скоростью 20 мл/мин;
- на вкладке «Sample Info» окна «PyrisSeries-STA6000» взвешивается пустая масса тигеля, очищенного кислотой и этиловым спиртом. Масса этого тигеля измеряется встроенным в аппарат электронными весами с точностью 10⁻⁶г и отмечается в программе автоматически;
- образцы заполняются в пустой тигель и помещаются в аппарат. Программное обеспечение автоматически вычисляет разницу в весе, определяя тем самым массу образцов. Эта масса запоминается программой;
- во второй части программа тестирует подачу аргона со скоростью 20мл/мин;
- в третьей части вводятся данные о температуре, скорости нагрева и охлаждения образцов;
- в четвертой части происходит запоминание всех сделанных изменений. В этот момент продукты горения уносятся потоком аргона;
- площади экзо и эндотермических эффектов, полученные из термических кривых, вычисляются в графе «Peak Area» окна «Calculation» и определяются как энталпия (мл Дж/г).

Температура образца измерялась эталонным оптическим монохроматическим пирометром ЭОП-66 через призму внутреннего отражения. Погрешность измерения температуры образца во всем температурном диапазоне исследований не превышала 0,3%.

Калориметрическая система включала массивный цилиндрический медный блок, расположенный коаксиально оболочке из нержавеющей стали, размещенной в водяном терmostате. Температура термостата автоматически поддерживалась постоянной с погрешностью 0,001К.

Блок калориметра защищался от теплового воздействия нагревателя, а образец в приемном устройстве от торцевых тепловых потерь установленными между печью и блоком тремя охранными устройствами. Функция теплового значения калориметрической системы определялась градуировкой, при которой тепло образца имитировалось измеряемой энергией электрического нагревателя.

Герметичный объем установки откачивался форвакуумным и диффузионным насосами до $5 \cdot 10^{-2}$ Па и заполнялся аргоном до $1,05 \cdot 10^5$ Па. Образец нагревался в печи до заданной температуры со скоростью около 1,5К/с и охлаждался в калориметре со скоростью 2,0÷1,0К/с.

Исследуемый диоксид циркония помещался в ампулы, изготовленные из кварца, в количестве $m_{\text{ZrO}_2} = 4 \cdot 10^{-2}$ г.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Методом термического дифференциального анализа (DTA) можно получить информацию о фазовых переходах, структурных и модификационных изменениях вещества в зависимости от температуры. Эксперименты проводились на установке (Perkin Elmer Simultaneous Thermal Analyzer, STA 6000, США). Был проведен термический анализ ZrO_2 с целью выявления изменений. Соответствующий спектр показан на Рис.1. Структурные изменения, фазовые и модификационные переходы в ZrO_2 указаны в ДТ (сканирующий дифференциальный термический анализ) и DTA кривых, а зависи-

мость потери массы от температуры – на ТГА (термогравиметрической) кривой. Видно, что на ТГА кривой общая потеря массы монотонно возрастает при $T \leq 30$ °C и достигает примерно 2.2%. Основная потеря массы объясняется разложением адсорбированной воды.

Известно, что в интервале 1170÷2370°C в ZrO_2 происходит фазовый переход. Во время этого перехода параметры решетки системы меняются в пределах ± 0.001 . Малый эндоэффект, обнаруженный в слабом DTA сигнале при 1170°C, еще раз подтверждает существование этого перехода. Также обнаруживается изменение α -модификации в DTA сигнале при 2370°C. При высоких значениях температуры не обнаружено явных изменений на ТГ кривой.

Фазовые превращения в ZrO_2 изучены рентгенографическими методами (Рис.2). В этих [1-5] и других подобных исследованиях было показано, что полиморфное превращение моноклинной структуры в тетрагональную происходит не при постоянной температуре, что характерно для фазовых переходов первого рода, а в некоторой температурной области [3]. Такой же вывод был сделан при исследовании теплового расширения поликристаллических твердых растворов диоксидов циркония. В зоне фазового превращения эта тенденция наблюдается и в работах по измерению энталпии. Фазовое превращение тетрагональной структуры диоксида циркония в кубическую экспериментально обнаружено только в работе [1] и при измерении теплоемкости [1,2,6].

Энталпию ZrO_2 ($M=123,22$) определяли в интервале температур $T=1200 \div 2900$ К. Известно, что диоксид циркония в исследованной области температур имеет два фазовых перехода [9], перестройка решетки в которых проходит с небольшой скоростью. Для обеспечения фазового превращения всей массы вещества в области фазового перехода образцы выдерживали при температуре исследования около 1 ч. Косвенный контроль полноты превращения осуществ-

лялся чередованием исследований для различных фаз на одном образце.

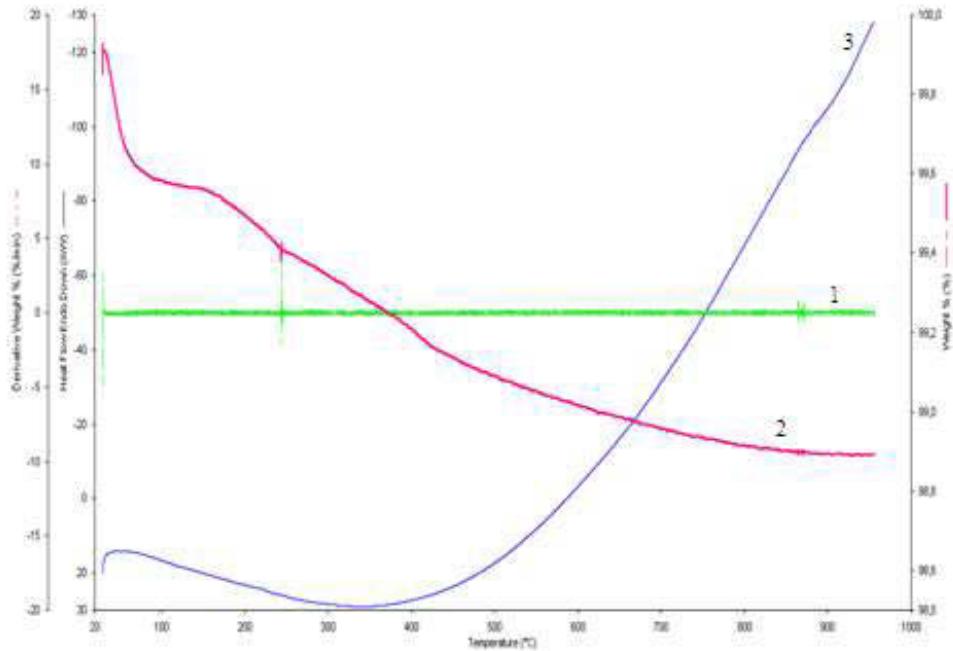


Рис.1
Термодинамический анализ исходного нано - ZrO₂:1 -ДТА; 2 – ТГА; 3 – ДТ.

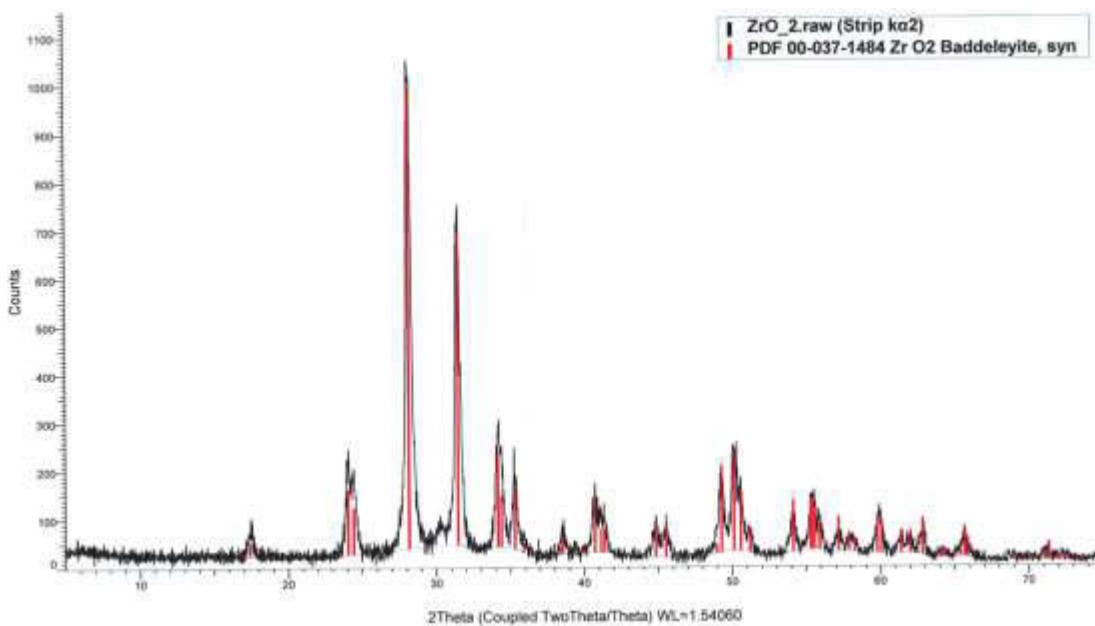


Рис.2
Рентгенограмма фазовых превращений в ZrO₂

При измерении энталпии веществ методом смешения необходимо учитывать особенности методики, согласно которой образец в одном опыте дважды претерпева-

ет структурное преобразование. Нагрев образца в печи выше измеряемой температуры перехода вызывает полное или частичное превращение одной структуры в другую, а

при попадании образца в калориметр осуществляется обратный переход, скрытая теплота которого, выделяемая при охлаждении, измеряется вместе с общей энергией, выделенной образцом. Таким образом, по описываемой методике фазовые превращения [4,5,8] фиксируются при охлаждении образца.

Полученные результаты представлены на Рис.3. в виде средней теплоемкости $c_p = (H_T - H_{298.15}) / (T - T_0)$. Как видно, экспериментальные точки образуют три условные температурные зоны: (I - ~1200÷~1450K, II - ~1450K÷~2650K, III - ~2650÷2900K), отличающиеся скоростью изменения энталпии. Учитывая литературные источники, можно констатировать, что на I участке диоксид циркония имеет моноклинную структуру, которая при T_1 полностью переходит в тетрагональную модификацию (II зона).

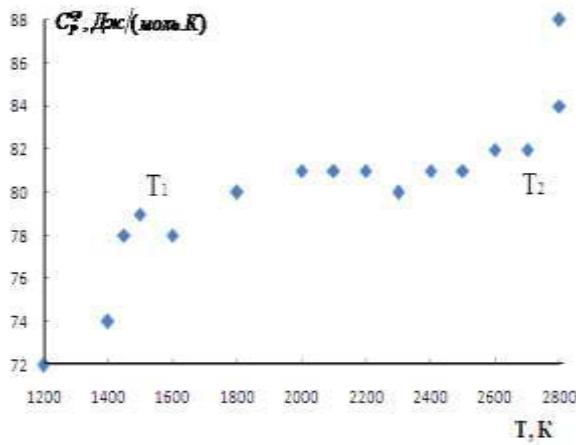


Рис.3

Среднее значение теплоемкости диоксида циркония

При температуре T_2 изменение скорости роста энталпии (средней теплоемкости) связывается с полиморфным превращением диоксида циркония из тетрагональной структуры в кубическую [10-12].

Фазовый переход из моноклинной в тетрагональную изучался в работах [1-3], в которых утверждалось, что моноклинная фаза ZrO_2 обратимо переходит в тетрагональную модификацию в пределах, равных ~70К, и что это превращение, скорее всего, относится к переходам диффузного типа, которые не связываются со скачкообразным

выделением тепла. В связи с этим при обработке полученных данных предполагалось, что в интервале температур $T_1 \leq T \leq T_1 + \Delta T$ находился в двухфазном состоянии (моноклинная + тетрагональная) с соотношением фаз, зависящим от температуры. Экспериментально полученные значения по энталпии ZrO_2 во всем интервале температур аппроксимировались единым уравнением, которое учитывало структуру вещества:

$$H_T - H_{298.15} = (1 - k_1) H^m(T) + k_1 (1 - k_2) H^t(T) + k_2 H^c(T), \quad (1)$$

где- $H^m(T)$, $H^t(T)$, $H^c(T)$ – линии регрессий энталпий для моноклинной, тетрагональной и кубической модификаций, соответственно. Коэффициенты k_1 и k_2 (концентрации тетрагональной и кубической структур) принимают следующие значения: $k_1=0$ для моноклинной модификации, $k_1=1$ для тетрагональной и кубической, $k_1=[(T_1 - T_1)/(\Delta T)]^r$ для раствора моноклинной и тетрагональной, $k_2=1$ для кубической и $k_2=0$ для остальных.

Задаваясь уравнениями теплоемкостей для моноклинной (2), тетрагональной (3) и кубической (4) модификаций:

$$C_P^m = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 [1/T^2], \quad (2)$$

$$C_P^t = a_4 + a_5 T + a_6 T^2, \quad (3)$$

$$C_P^K = a_7 + a_8 T + a_9 T^2, \quad (4)$$

и учитывая (1), получаем уравнение для средней теплоемкости во всем изучаемом интервале температур:

$$\bar{C}_P = (1 - k_1) [a_0 + a_1 (T + T_0)/2 + a_2 ((T^2 + T_0 T + T_0^2)/3 - a_3/T_0 T)] + \\ k_1 (1 - k_2) [a_4 + a_5 (T + T_0)/2 + a_6 (T^2 + T T_0 + T_0^2)/3] + \\ + (1 - k_2) [a_4 + a_5 (T + T_0)/2 + a_6 (T^2 + T T_0 + T_0^2)/3] \quad (5)$$

Коэффициенты уравнения (5) рассчитывали методом наименьших квадратов. Значения T_1 , $T_1 + \Delta T$ определялись по минимуму суммы квадратов отклонений. Полученные оценки показали, что превращение из одной структуры в другую происходит в интервале $T_1 + \Delta T = 9$ К, соизмеримом с

погрешностью эксперимента, и является переходом I рода ($T_1=1450\text{K}$). По проведенным расчетам превращение тетрагональной модификации в кубическую происходит при температуре $T_2=2660\text{K}$.

Получены следующие расчетные параметры уравнения (5) (для энталпии в Дж/моль): $a_1=6,94045\times 10$; $a_2=8,79621\times 10^{-3}$; $a_3=-1,43165\times 10^6$; $a_4=7,52967\times 10^1$; $a_5=3,55216 \times 10^{-3}$; $a_6=4,93324\times 10$; $a_7=2,39006\times 10^{-2}$ и $S_0^2=0,589$ (дисперсия результатов измерений).

1. А.Г.Богданов, В.С.Руденко, А.Г.Макаров. Рентгенографическое исследование двуокисей циркония и гафния при температурах до 2750°C , ДАН СССР, (1985) 43-45.
2. G.M. Wolten, J. Amer. Ceram. Soc., 46 (1983) 418-420.
3. J.P.Stansfeld, J. Amer. Ceram. Soc., 48 (1995) 436-
4. J.P.Coughlin, E.G.King, J. Amer. Ceram. Soc., 72 (1990) 2262-
5. Д.Ш.Цагарешвили, Г.Г.Гвелисиани, Труды Грузинского Института металлургии, XIV №4 (1984) 187-
6. C.D.Pears, Southern Res. Inst., USAF ASD-TDR-62-765, (1993) 1-420.
7. В.Я.Чеховской, В.Д.Тарасов, И.А. Жукова, ТВТ, 12 (1984) 1224-1231.
8. В.Я.Чеховской, И.А.Жукова, В.Д. Тарасов, ТВТ, 17 (1989) 754-757.
9. Термодинамические свойства индивидуальных веществ, Справочник под ред. Акад. В.Г.Глушко, М.: Наука, 4 (1982) 114.
10. С.А.Кац, В.Я.Чеховской, М.Д.Каваленко, Теплофизические свойства циркония и гафния при высоких температурах, Док. АН СССР, I (1983) 395-397.
11. Ю.Е.Щелудяк, Л.Я.Кашпаров и др., Теплофизические свойства компонентов горячих систем, (1992) 184.
12. Я.Шестак, Теория термического анализа. Физико-химические свойства твердых неорганических веществ, М.: Мир, (1987) 450.

NANO-DİOKSID SİRKONİUMDA FAZA KEÇİDLƏRİNİN TƏDQİQİ

A.A.QƏRİBOV, T.N.AĞAYEV, G.T.İMANOVA, İ.A.MƏMMƏDYAROVA

Dioksid sirkoniumun $T=1200\div 2000\text{K}$ temperatur aralığında entalpiyası ölçülmüşdür. Müəyyən edilmişdir ki, bu temperatur aralığında ZrO_2 -də iki polimorf çevrilərə baş verir. Bu çevrilərlərin istilik miqdarının qiymətləri təyin olunub: müvafiq olaraq aşağıtemperaturlu və yüksəktemperaturlu. Həmçinin monoklin haldan tetraqonal və tetraqonal haldan kubik hala keçidlərin entalpiyaları da təyin olunmuşdur.

INVESTIGATION OF PHASE TRANSITIONS IN NANO-ZIRCONIUM DIOXIDE

A.A.GARİBOV, T.N.AGAYEV, G.T.İMANOVA, İ.A.MAMMADYAROVA

The zirconium dioxide enthalpy has been measured in the range of temperatures $T=1200\div 2000\text{K}$. Two polymorphic transformations in ZrO_2 in this temperature interval have been revealed. Value of low- and high-temperature warmth of polymorphic transformations and an enthalpy of transformation of monocline modification in tetragonal and tetragonal in the cubic have been defined.

УДК 546.22/.24; 538.935; 541.148

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ В СИСТЕМЕ TlSe-YbSe, ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛА TlYbSe₂

Ф.М.СЕИДОВ, Э.М.КЕРИМОВА, Р.З.САДЫХОВ, Р.Г.ВЕЛИЕВ, Н.З.ГАСАНОВ,
К.М.ГУСЕЙНОВА

Институт физики НАН Азербайджана
AZ-1143, Баку, пр. Г.Джавида, 131
ramizveliyev@gmail.com

Поступила: 09.04.2015

Принята к печати: 23.06.2015

РЕФЕРАТ

Методом дифференциально-термографического анализа выявлено, что в системе TlSe-YbSe при соотношении компонентов 1:1 образуется соединение TlYbSe₂ с инконгруэнтным плавлением, а на основе TlSe при комнатной температуре растворяется 2моль% YbSe. Рентгенографическим анализом установлено, что TlYbSe₂ кристаллизуется в тетрагональной сингонии.

Исследования электрических свойств показали, что TlYbSe₂ обладает р-типом проводимости. Определена ширина запрещенной зоны TlYbSe₂, а также механизм рассеяния носителей тока в нем. Измерениями магнитных характеристик установлено, что соединение TlYbSe₂ обладает парамагнитным состоянием.

Ключевые слова: дифференциально-термический анализ, электропроводность, удельная намагниченность.

Тройные таллиевые халькогениды редкоземельных элементов являются одними из представителей нового класса полупроводников, привлекающего большое внимание исследователей [1-13]. Как известно, кристаллическая структура TlSe составлена из двух самостоятельных структурных единиц – восьмивершинника, с ионным характером связи M-X (металл-халькоген, Tl¹⁺-Se) и тетраэдра, с ковалентной связью между M-X (Tl³⁺-Se) [3]. Для управления полупроводниковыми свойствами при катионном замещении в структурных рамках типа TlSe практически возможным и наиболее рациональным является замещение трехвалентных ионов таллия в тетраэдрах соответствующими элементами III^B подгруппы (Ga, In), а также трехвалентными редкоземельными элементами (Yb, Sm, Er, Dy, Gd) [3,7-9], не затрагивая при этом одновалентных ионов Tl¹⁺ в восьмивершиннике. Поэтому большой

интерес вызывает, в частности, исследование взаимодействия TlSe с YbSe. В этой связи в настоящей работе было изучено фазовое равновесие в системе TlSe-YbSe, а также электрические и магнитные свойства кристалла TlYbSe₂.

Образцы системы TlSe-YbSe готовили сплавлением в кварцевых ампулах соединений TlSe и YbSe, взятых в различных соотношениях. При этом температуру печи поднимали со скоростью 5К/мин до 1440÷1490К. Выдерживали при этой температуре 6÷7 часов и потом медленно снижали температуру до комнатной. Сплавы, содержащие до 50моль% YbSe, отжигали при температуре (620±10)К в течение 650 часов, а сплавы с концентрацией YbSe 50÷100моль% - при (1340±20)К в течение 590ч.

Построенная по результатам дифференциально-термографического анализа диаграмма состояния системы TlSe-YbSe показана на Рис.1. Низкотемпературную часть

диаграммы состояния этой системы исследовали на приборе НТР-64, а высокотемпературную часть - на установке ВДТА-8, позволяющей работать до 2470К под давлением спектрально чистого гелия.

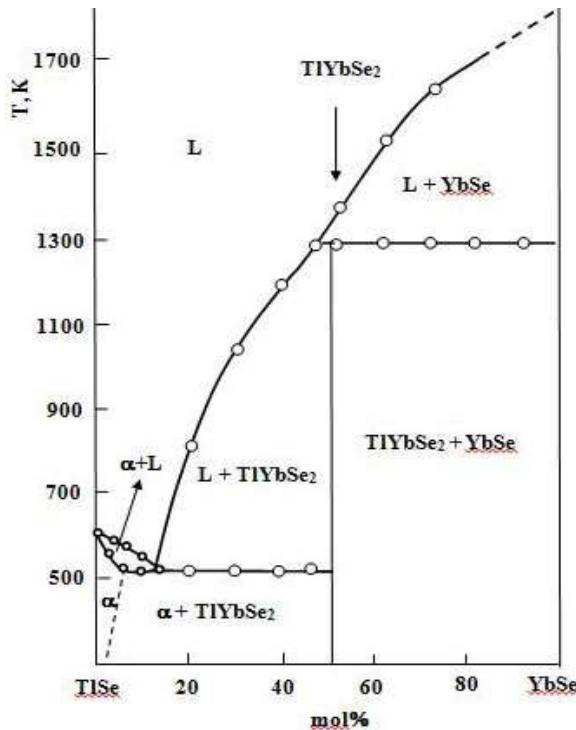


Рис.1

Диаграмма состояния системы TlSe-YbSe.

Из диаграммы состояния следует, что в системе TlSe-YbSe при соотношении компонентов 1:1 по перитектической реакции $\text{Ж}+\text{YbSe}\leftrightarrow\text{TlYbSe}_2(\text{тв.})$ образуется соединение TlYbSe₂, которое инконгруэнтно плавится при температуре $T_{\text{пл}}=(1300\pm20)\text{K}$.

В системе TlSe-YbSe со стороны TlSe образуется нонвариантная эвтектика состава $(\text{TlSe})_{0,87}(\text{YbSe})_{0,13}$, плавящаяся при температуре 540К. Для определения состава эвтектики был построен треугольник Таммана. При комнатной температуре в TlSe растворяется 2моль% YbSe. Кроме того, в системе TlSe-YbSe образующаяся перитектическая точка отвечает составу $(\text{TlSe})_{0,55}(\text{YbSe})_{0,45}$ и температуре 1300К.

Рентгенограммы порошковых образцов TlYbSe₂ снимали на установке УРС-55 (Сук_α-излучение, $\lambda=1,5418\text{\AA}$, фильтр - Ni, режим: 35кВ, 10mA) в камере РКД-57,3мм. По результатам рентгенографического анализа установлено, что соединение TlYbSe₂ кристаллизуется в тетрагональной сингонии с параметрами элементарной ячейки: $a=8,31\text{\AA}$; $c=7,22\text{\AA}$. Расчет рентгенограммы кристалла TlYbSe₂ приведен в Таблице.

Для исследования электрических свойств соединения TlYbSe₂ были получены его монокристаллы, выращенные видоизмененным методом Бриджмена-Стокбаргера в специально изготовленных ампулах из плавленого кварца. Внутренние стенки ампулы были покрыты слоем графита. Ампулы помещали в вертикальную двухзонную печь. Равновесную температуру в верхней высокотемпературной зоне устанавливали на $25\div30\text{K}$ выше температуры плавления ($T_{\text{пл}}$) вещества, а температура низкотемпературной зоны была на $30\div40\text{K}$ ниже $T_{\text{пл}}$. Между этими двумя зонами имелась переходная зона с градиентом температуры $\sim20\text{K}/\text{см}$. Ампула с веществом с помощью специального механизма вводилась вдоль оси трубчатой печи в верхнюю высокотемпературную зону и после $15\div20$ -часовой стабилизации режима перемещалась вниз со скоростью 0,8мм/час. За 7÷8 дней ампула с веществом, полностью пройдя через переходную зону кристаллизации, оказывалась в низкотемпературной зоне печи. Затем температуры обоих зон медленно (2÷3 суток) понижались до комнатной. Полученные таким образом слитки TlYbSe₂ состояли из ориентированных вдоль ампулы длинных ($\sim11\text{cm}$) тончайших волокон, образующих монолитный кристалл.

Электропроводность и коэффициент Холла монокристалла TlYbSe₂ исследовали компенсационным методом. Образцы для измерений имели форму прямоугольного параллелепипеда с размерами $(3\times4\times11)\cdot10^{-3}\text{м}$. Для создания надежных омических контактов вольфрамовые зонды приваривали к боковым

граням образца при помощи конденсаторного разряда.

На Рис.2 приведены температурные зависимости электропроводности и коэффициента Холла кристаллов TlYbSe₂. Электропроводность σ увеличивается с ростом температуры, т.е. зависимость $\sigma(T)$ имеет полупроводниковый характер. Экспоненциальный рост электропроводности с температурой в области вы-

соких температур связан с появлением собственной проводимости. Было определено значение ширины запрещенной зоны (E_g) исследуемых кристаллов по высокотемпературным участкам кривых $\lg(RT^{3/2}) = f(\frac{10^3}{T})$ и $\lg\sigma = f(\frac{10^3}{T})$, из наклона которых получена величина E_g , равная 0,58 эВ.

Таблица

Расчет рентгенограммы кристалла TlYbSe₂.

Nº	I, %	θ	$\sin \theta$	$d_{\text{эксп}}, \text{\AA}$	hkl	$d_{\text{расч}}, \text{\AA}$
1	7	10°40'	0,1851	4,16	200	4,15
2	7	14°54'	0,2571	2,99	220	2,98
3	10	16°48'	0,2890	2,67	310	2,68
4	4	20°12'	0,3483	2,23	113	2,23
5	4	21°30'	0,3665	2,09	400	2,10
6	6	23°18'	0,3955	1,95	330	1,96
7	4	24°12'	0,4099	1,88	420	1,89
8	5	25°24'	0,4289	1,79	004	1,78
9	5	26°36'	0,4478	1,72	114	1,71
10	2	27°42'	0,4648	1,66	510	1,66
11	2	30°18'	0,5045	1,53	521	1,52
12	3	31°24'	0,5210	1,48	440	1,49
13	2	32°18'	0,5344	1,44	530	1,44
14	2	33°18'	0,5490	1,40	600	1,42
15	2	36°30'	0,5948	1,29	424	1,30
16	3	37°31'	0,6088	1,27	315	1,29
17	4	38°32'	0,6225	1,24	631	1,23
18	2	42°30'	0,6756	1,14	206	1,15
19	3	44°18'	0,6984	1,10	730	1,11
20	2	48°30'	0,7490	1,03	800	1,03

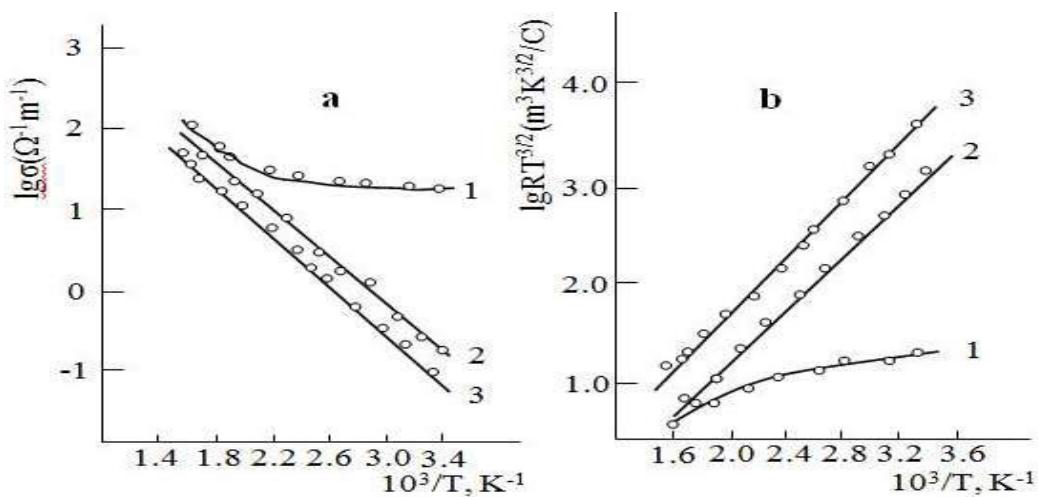


Рис.2

Температурные зависимости электропроводности (а) и коэффициента Холла (б) для трех образцов монокристаллов TlYbSe₂, взятых из разных частей слитка.

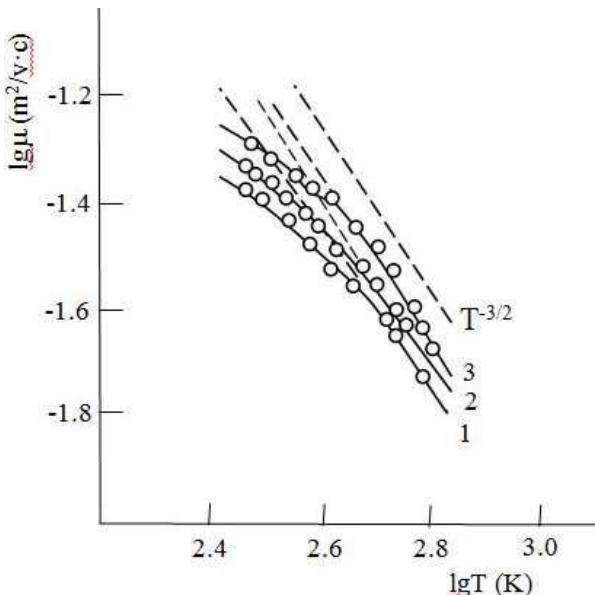


Рис.3

Температурные зависимости холловской подвижности носителей тока для трех образцов монокристаллов $TlYbSe_2$, взятых из разных частей слитка.

Изучены температурные зависимости Холловской подвижности носителей тока кристалла $TlYbSe_2$. Установлено, что изменение подвижности носителей тока с температурой (Рис.3) следует закону $\mu \rightarrow T^{-\frac{3}{2}}$, что соответствует их рассеянию на акустических колебаниях решетки.

Исследованы также магнитные свойства соединения $TlYbSe_2$. Намагниченность измерена на маятниковом магнитометре Доменикали, парамагнитная восприимчивость – методом Фарадея на магнитоэлектрических весах. На Рис.4 приведена зависимость удельной намагниченности $TlYbSe_2$ от магнитного поля при 77К. Эта зависимость характерна для парамагнитных материалов. О парамагнитном состоянии в $TlYbSe_2$ свидетельствует и температурная зависимость обратной парамагнитной восприимчивости этого соединения, измеренная в температурном интервале 77÷300К (Рис.5). Из зависимости $\chi^{-1}(T)$ рассчитано экспериментальное значение эффективного магнитного момента $TlYbSe_2$, которое оказалось равным $3,75\mu_B$.

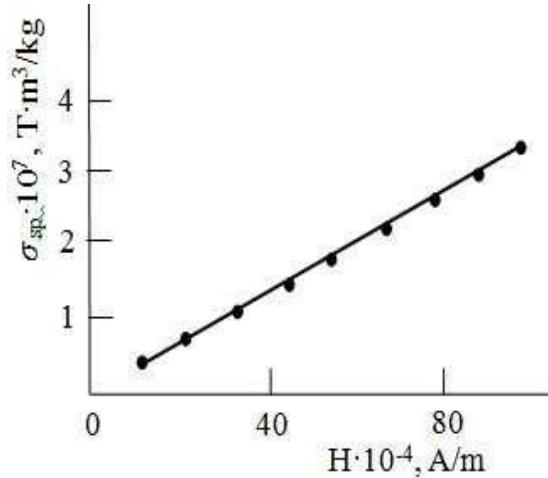


Рис.4

Зависимость удельной намагниченности $TlYbSe_2$ от магнитного поля при температуре 77К.

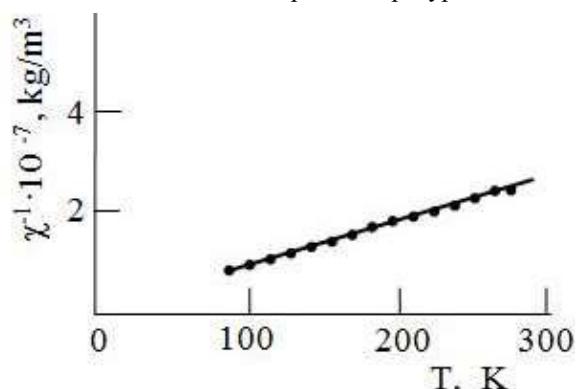


Рис.5

Температурная зависимость обратной Парамагнитной восприимчивости $lYbSe_2$.

1. G.D.Guseinov, G.B.Abdullayev, S.M.Bidzinova, F.M.Seidov, M.Z.Ismailov A.M.Pashayev, On new analogs of $TlSe$ -type semiconductor compounds, Physics Letters **33A** (1970) 421-422.
2. S.Kabre, M.Julien-Pouzol, M.Guittard, Etude cristallographique des combinaisons ternaires formées par le thallium, les terres rares et le soufre, le sélénium ou la tellure, le long des binaires $Tl_2X-L_2X_3$, Bull. Soc. Chim. France, **9-10** (1974) 1881-1886.
3. Ф.М.Сеидов, Получение и исследование электрофизических и тепловых свойств новых сложных полупроводников типа ABX_2 (где А

- Tl; B – Ga, Yb; X – S, Se, Te), Автореферат дис. канд. физ.-мат. наук, Баку (1977) 18.
- 4. П.Г.Рустамов, О.М.Алиев, Т.Х.Курбанов, Тройные халькогениды редкоземельных элементов, Баку, Элм (1981) 120.
- 5. M.Duczmal, L.Pawlak, Magnetic properties of TlLnS₂ compounds (Ln = Nd, Gd, Dy, Er and Yb), J.Alloys Comp., **209** (1994) 271–274.
- 6. M.Duczmal, L.Pawlak, S.Pokrzywnicki, Magnetic properties of layer-type compounds TlGdS₂ and TlGdSe₂, Acta Physica Polonica A, **97** (2000) 839-842.
- 7. М.М.Зарбалиев, Твердые растворы TlIn_{1-x}Yb_xS₂, Неорган. материалы, **36** (2000) 619-623.
- 8. E.M.Kerimova, S.N.Mustafaeva, Yu.G.Asadov, R.N.Kerimov, Synthesis, growth and properties of TlGa_{1-x}Yb_xS₂ crystals, Crystallography Reports, **50** (2005) 122–123.
- 9. F.M.Seyidov, E.M.Kerimova, N.Z.Gasanov, Sh.D.Alizade, Interaction of TlInS₂ with TlYbS₂ and electric, thermal properties of crystals (TlInS₂)_{1-x}(TlYbS₂)_x (x=0÷0,12), Book of Abstracts 16-th Intern. Conf. on Ternary and Multinary Compounds, Sept.15-19, Tech. Univ. Berlin, Germany, (2008) ID 93.
- 10. А.М.Пашаев, Ф.М.Сейдов, Э.М.Керимова, С.М.Бидзинова, К.М.Гусейнова, Взаимодействие TlSe с YbSe и тепловые свойства тройных монохалькогенидов TlYbS₂ (Se₂, Te₂), Труды международной конференции «Научно-технический прогресс и современная авиаация», Баку (2009) 272.
- 11. Ф.М.Сейдов, Э.М.Керимова, Н.З.Гасанов, Диаграмма состояния системы TlSe-SmSe и транспортные свойства кристаллов TlSmX₂ (X-S, Se, Te), Неорган. материалы, **46** (2010) 1433-1437.
- 12. Ф.М.Сейдов, Э.М.Керимова, Н.З.Гасанов, Фазовые равновесия в системе TlInS₂-TlYbS₂ и электрические свойства кристаллов Tl₂InYbS₄, Неорган. материалы, **47** (2011) 1429-1432.
- 13. А.М.Пашаев, С.Н.Мустафаева, Э.М.Керимова, Н.З.Гасанов, Диэлектрические и оптические свойства легированных редкоземельными элементами монокристаллов TlInS₂ и TlInSe₂, Ученые записки Национальной Академии Авиации, **16** (2014) 29-37.

TlSe-YbSe SİSTEMİNDƏ FAZA TARAZLIĞININ ÖYRƏNİLMƏSİ, TlYbSe₂ KRİSTALININ ELEKTRİK VƏ MAQNİT XASSƏLƏRİ

**F.M.SEYİDOV, E.M.KƏRİMOVA, R.Z.SADİXOV, R.Q.VƏLİYEV, N.Z.HƏSƏNOV,
K.M.HÜSEYNOVA**

Differensial-termoqrafik analiz üsulu ilə müəyyən edilmişdir ki, TlSe-YbSe sistemində komponentlərin 1:1-ə nisbətində inkongruent əriyən TlYbSe₂ birləşməsi əmələ gəlir və həmçinin TlSe-in əsasında otaq temperaturunda YbSe 2mol%-a qədər həll olunur. Rentqenqrafik analiz nəticəsində aşkar edilmişdir ki, TlYbSe₂ tetraqonal sinqoniyada kristallaşır.

Elektrik xassələrinin tədqiqi göstərdi ki, TlYbSe₂ p-tipli keçiriciliyə malikdir. TlYbSe₂-in qadağan zonasının eni və yüksək daşıyıcılarının səpilmə mexanizmi təyin edilmişdir. Maqnit xassələrinin ölçmələri göstərdi ki, TlYbSe₂ birləşməsi paramaqnit hala malikdir.

THE STUDY OF PHASE EQUILIBRIUM IN THE SYSTEM TlSe-YbSe, ELECTRICAL AND MAGNETIC PROPERTIES OF TlYbSe₂ CRYSTAL

F.M.SEYİDOV, E.M.KERİMOVA, R.Z.SADİXOV, R.Q.VELİYEV, N.Z.GASANOV, K.M.GUSEYNOVA

It has been determined by the differential thermal analysis method that in the system of TlSe-YbSe with the ratio 1:1, a TlYbSe₂ compound with incongruent melting has been formed, and 2mol% YbSe has been dissolved in TlSe at room temperature. It has been shown by X-ray analysis that TlYbSe₂ has been crystallized in the tetragonal system.

Investigation of electrical properties has shown that TlYbSe₂ had p-type conductivity. The band gap of TlYbSe₂, as well as the mechanism of carrier scattering in it have been determined. Measurements of the magnetic characteristics have shown that the compound TlYbSe₂ has a paramagnetic state.

Редактор: проф. Ю.Асадов

УДК: 538.56:621.365

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МЕЗОПОРЯДКА В АЦЕТОНЕ

С.Т.АЗИЗОВ, К.Э.ЗУЛЬФУГАРЗАДЕ, О.А.АЛИЕВ, Ч.О.КАДЖАР

Институт Физики НАН Азербайджана

AZ 1143, г. Баку, пр. Г. Джавида, 131

samir_azizov@rambler.ru

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

Изучены диэлектрические проявления трансляционной–вращательной кинетики кластеризованных молекул ацетона. В качестве критерия относительной значимости этих составляющих выбрано сопоставление энергий активации трех явлений переноса: электропроводности (E_γ), вязкого течения (E_η) и диэлектрической релаксации (E_r). Экспериментально установленная последовательность $E_r \geq E_\eta \geq E_\gamma$ обсуждается в терминах трансляционно-вращательной динамики молекулярных кластеров ацетона

Ключевые слова: диэлектрическая спектроскопия, диэлектрические свойства жидкостей, молекулярная спектроскопия, кластеры, ацетон.

ВВЕДЕНИЕ

Диэлектрическая спектроскопия молекулярных жидкостей изучает процессы формирования ориентационной составляющей электрической поляризации с целью получения информации о строении среды, в которой осуществляется вращательное движение структурных единиц-носителей постоянных электрических диполей. Традиционная интерпретация релаксационных спектров дисперсии-поглощения базируется на двух постулатах [1,2]: 1) одиночные молекулы являются единственным видом носителей диполей; 2) ориентационная подвижность носителя определяется его структурой и ближним порядком.

Между тем, структурирование аморфных сред лишь отчасти совпадает с понятием ближнего порядка. Ещё одна, более протяжённая разновидность локального упорядочения – промежуточный порядок, отражает существование многоуровневой иерархии кинетически стабильных молекулярных скоплений-кластеров. В отличие от случайных и бесструктурных флюктуационных образований, каждому кластеру соответствует конечное, строго фиксированное число молекул и конкретный набор физико-химических характеристик.

Основным источником экспериментальной информации о кластерах является спектроскопические методы вследствие их более высокой чувствительности к структурированию на уровне промежуточного порядка по сравнению с возможностями так называемых «прямых» дифракционных методов. В частности, в рамках метода диэлектрической спектроскопии конденсированных сред надежно установлено, что кластеризация охватывает более 90% молекул в некоторых алифатических моноспиртах, амидах, уксусной кислоте, а также в чистой воде, и водных растворах некоторых аминокислот. Общим для всех этих объектов является наличие структурирующего эффекта межмолекулярной водородной связи. Сильно выраженная анизотропия угловых корреляций кластеризованных молекул создает благоприятные условия для экспериментального обнаружения промежуточного порядка в этих средах.

Менее очевидна кластеризация так называемых «неассоциированных» жидкостей, построенных на основе изотропных и сравнительно слабых вандерваальсовых межмолекулярных взаимодействий. Характерное для таких объектов уменьшение пространственно-временной разнесённости промежуточного и ближнего порядков приводит к сближению

диэлектрических параметров предполагаемых вандервальсовых кластеров и одиночных молекул.

Цель настоящего исследования состояла в исследовании и изучении некоторых диэлектрических аспектов локального структурирования в «неассоциированных» жидкостях. Достижение указанной цели осуществлено сопоставлением температурных коэффициентов («энергий активации») времени диэлектрической релаксации, сдвиговой вязкости и удельной электропроводности на постоянном токе, так как эти три явления переноса значительно отличаются по соотношению трансляционного и вращательного вкладов в соответствующем динамическом процессе.

ТЕОРИЯ

Согласно Дебаю дисперсия диэлектрической проницаемости ϵ' и связанные с дисперсией диэлектрические потери ϵ'' описываются уравнениями:

$$\epsilon' = \epsilon_\infty + (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) \left[1 + \left(\frac{f}{f_m} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (1)$$

$$\epsilon'' = \left(\frac{f}{f_m} \right) (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) \left[1 + \left(\frac{f}{f_m} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (2)$$

здесь f - частота (Гц) приложенного к образцу внешнего электрического поля; f_m - критическая частота, соответствующая максимальному значению ϵ''_M ($= \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{2}$ при $f = f_m$) и определяемая соотношением

$$f_m = (2\pi\tau)^{-1}, \quad (3)$$

где τ - время диэлектрической релаксации, характеризующая скорость процесса формирования ориентационной составляющей электрической поляризации.

Диэлектрические проницаемости ϵ_0 и ϵ_∞ фиксируют границы частного диапазона, соответствующего амплитуде ($\epsilon_0 - \epsilon_\infty$) ори-

ентационной поляризации, согласно условиям

$$\frac{f}{f_m} \ll 1 \text{ или } f \leq 0,01 f_m \text{ и } \epsilon' \equiv \epsilon_0, \quad (4)$$

$$\frac{f}{f_m} \gg 1 \text{ или } f \geq 100 f_m \text{ и } \epsilon' \equiv \epsilon_\infty. \quad (5)$$

В обоих случаях диэлектрические потери $\epsilon'' \rightarrow 0$. Однако, в реальных диэлектриках всегда $\epsilon'' \neq 0$, поскольку на высокочастотное и низкочастотное крылья релаксационного спектра накладываются соответственно низкочастотный край колебательно-вращательного спектра и омические потери созданные переносом электрических зарядов. В последнем случае уравнение (2) заменяется следующим

$$\epsilon'' = \epsilon_d'' + \epsilon_\gamma'', \quad (6)$$

где дипольный вклад ϵ_d'' дается, с учетом (4), как

$$\epsilon_d'' = (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) \left(\frac{f}{f_m} \right), \quad (7)$$

а омический вклад, как

$$\epsilon_\gamma'' = 1,8 \cdot 10^{12} \gamma/f, \quad (8)$$

где γ - удельная электропроводность на постоянном токе в единицах $\Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$.

При записи (7) - (8) в виде:

$$\epsilon_d''/f = (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) \cdot f_m^{-1}, \quad (9)$$

$$\epsilon_\gamma''/f = 1,8 \cdot 10^{12} \gamma, \quad (10)$$

правые части (9) и (10) содержат величины, не зависящие от частоты (при фиксированной температуре). Эта особенность позволяет использовать значение диэлектрических потерь, измеренные на частотах, удовлетворяющих условию (4), для разделения релаксационного и омического вкладов по характеру частотных зависимостей произведения ϵ''/f и частного ϵ''/f

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Ацетон выбран как типичный представитель «неассоциированных» жидкостей. Сведения по диэлектрическим свойствам

ацетона даны в обзоре [3], по вязкости – в [4]. Метод диэлектрической спектроскопии позволяет более детально изучить диэлектрические свойства объекта исследований благодаря большой равновесной («статической») диэлектрической проницаемости ацетона и, соответственно, достаточно высокой степени диссоциации молекул. Использование высокочастотных измерений в диапазоне $10^5 \div 10^6$ Гц полностью исключает те многочисленные и, как правило, трудно учитываемые источники погрешностей, которые присущи стандартным методам определения электропроводности жидкостей при нулевой частоте. Для определения омической ветви спектра поглощения в диапазоне частот $10^5 \div 10^6$ Гц применена дифференциальная модификация резонансного метода измерения Q – метром комплексной проводимости (адmittанса) $Y^* = G + iB$ образца диэлектрика с $\epsilon^* = \epsilon' - i\epsilon''$

Эти величины связаны соотношением [21]

$$Y^* = i\omega C_0 \epsilon^*$$

$$\text{или } G = \omega C_0 \epsilon' \quad B = \omega C_0 \epsilon'',$$

где $i = \sqrt{-1}$; ω – угловая частота, C_0 – емкость пустого держателя образца ($\epsilon' = 1$; $\epsilon'' = 0$)

Использование эффекта «усиления по напряжению» позволяет связать активную составляющую G admитанса с обратным значением резонансной добротности Q^{-1} измерительного контура Q – метра. Реактивная составляющая B admитанса компенсируется собственной реактивностью контура при фиксированной частоте и определяется резонансным значением емкости C эталонного конденсатора Q – метра. Рабочие формулы стандартного метода имеют вид [5,6]

$$\epsilon' = (C_{uk} - C_\varepsilon) C_0^{-1}, \quad (11)$$

$$\epsilon'' = (Q_\varepsilon^{-1} - Q_{uk}^{-1}) C_{uk} C_0^{-1}, \quad (12)$$

где подстрочные индексы « uk » и « ε » относятся соответственно к настройкам в резонанс из-

мерительного контура куметра при свободных зажимах Q – метра и при подключении к ним ячейки, заполненной исследуемым образцом.

Следует подчеркнуть, что формулы (11)-(12) получены в неявном допущении совпадения admитанса на зажимах измерительного контура Q – метра с admитансом на зажимах держателя. Однако в реальных условиях измеренный admитанс Y_ε^* всегда отличается от истинного admитанса $Y^*(\varepsilon)$ образца на величину паразитного admитанса Y_{nap}^*

$$Y_\varepsilon^* = Y^*(\varepsilon) + Y_{nap}^*. \quad (13)$$

На частотах, не превышающих примерно МГц, основной вклад в Y_{nap}^* создается вспомогательным устройством, которое необходимо для подключения держателя к термостату, что вносит дополнительную и трудноучитываемую добавку в измеряемые значения емкостей и добротностей.

Дифференциальная модификация стандартного метода позволяет устранить необходимость учета этой добавки посредством введения новой настройки в резонанс при подключении к зажимам Q – метра пустой ячейки. В этом случае, по аналогии с (13)

$$Y_1^* = Y^*(1) + Y_{nap}^*, \quad (14)$$

где Y_1^* и $Y^*(1)$ соответственно измеренный и истинный admитансы пустого держателя. Вычитание (14) из (13) исключает вклад паразитного admитанса

$$Y_\varepsilon^* - Y_1^* = Y^*(\varepsilon) - Y^*(1). \quad (15)$$

Стандартные преобразования показывают, что соотношению (15) соответствуют новые, модифицированные рабочие формулы:

$$\epsilon' = 1 + (C_1 - C_\varepsilon) C_0^{-1}, \quad (16)$$

$$\epsilon'' = (Q_\varepsilon^{-1} - Q_1^{-1}) C_{uk} C_0^{-1}$$

$$\text{или } \epsilon'' = (Q_\varepsilon^{-1} - Q_1^{-1}) C_1 C_0^{-1}. \quad (17)$$

Поскольку $C_1 \equiv C_{uk}$ по определению.

Формально соотношения (12) и (17) тождественны. Однако привязка разностей $\Delta C = C_1 - C_\varepsilon$ и $\Delta Q^{-1} = Q_\varepsilon^{-1} - Q_1^{-1}$, к одному и тому же держателю существенно снижает вероятность систематической погрешности при оценке ε'' .

Эксперимент был проведен на частотах 0,5; 1; 2; 3; 5 МГц и температурах 20, 25, 30, 35, 40°C. В качестве держателя образца применен конденсатор цилиндрического типа. Температура образца поддерживалась постоянной. Ацетон марки ХЧ использовался без дополнительной очистки.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты измерений сведены в Таблицу 1, которая разделена на две части, содержащие величины, измеренные с образцом и без образца, соответственно.

Для уменьшения случайных ошибок проведено сглаживание температурно-частотных зависимостей, C_ε, Q_c а также $\Delta C = C_1 - C_\varepsilon$ и $\Delta Q^{-1} = Q_\varepsilon^{-1} - Q_1^{-1}$ с помощью метода наименьших квадратов

$$\Delta C = a_{\Delta c} + b_{\Delta c} t, \quad (18)$$

$$\Delta Q = a_{\Delta Q} + b_{\Delta Q} t. \quad (19)$$

Таблица 1

Резонансные емкости $C_\varepsilon, C_1(n\phi)$ и добротности Q_ε, Q_1 ацетона на разных частотах f (МГц) и температурах t (°C)

f	0,5		1,0		2,0		3,0		5,0	
t	C_ε	Q_ε								
20	298,0	26	175,5	30	144,5	47	187,0	76	146,5	88
25	299,0	29	176,0	33	145,0	49	188,0	74	147,0	86
30	299,0	29	176,5	33	145,5	50	188,5	76	147,5	90
35	301,0	30	178,5	36	146,0	54	190,0	80	148,5	90
40	302,0	32	179,0	39	147,0	51	190,0	76	149,0	83
C_1	309,0		186,5		155,0		197,0		156,0	
Q_1	167		150		162		165		162	

В Таблице 2 указаны значения коэффициентов эмпирических соотношений (18) - (19), аппроксимируемых температурные зависимости $\Delta C, \Delta Q$ при разных частотах.

Таблица 2

Коэффициенты уравнений (18)-(19) найденные по методу наименьших квадратов f (МГц)

f	0,5	1,0	2,0	3,0	5,0
$a_{\Delta C}$	15,38	14,79	13,96	13,25	11,86
$b_{\Delta C}$	-0,200	-0,190	-0,176	0,163	-0,129
$a_{\Delta Q} \cdot 10^4$	362,78	304,84	169,03	76,99	51,65
$b_{\Delta Q} \cdot 10^6$	-262,8	-237,2	-104,3	-22,0	0,0

Оцененные по данным Таблицы 2 значение ΔC , а также известные из литературы [3] значения равновесной диэлектрической проницаемости ε_0 ацетона, зависящие от температуры как

$$\varepsilon_0 = -8,8718 + \frac{8817,452}{T} \quad (T=273,2+t^0\text{C}), \quad (20)$$

использованы для нахождения параметра C_0 входящего в рабочие формулы (16) и (17), по соотношению

$$C_0 = \Delta C(\varepsilon_0 - 1). \quad (21)$$

В Таблице 3 даны значения C_0 и диэлектрические потери ε'' ацетона, вычисленные по (17) с использованием значений $\Delta Q = Q_\varepsilon^{-1} - Q_1^{-1}$ по данным таблицы 2 и C_1 из Таблицы 1.

Таблица 3

Параметр C_0 , диэлектрические потери ε'' и удельная электропроводность γ ацетона на разных частотах f (МГц) и температурах t ($^{\circ}$ С)

f	0,5		1,0		2,0		3,0		5,0		$\gamma \cdot 10^6$	
t	C_0 (пФ)	ε''	C_0	ε''	C_0	ε''	C_0	ε''	C_0	ε''	По (22)	По (26)
20	0,537	17,85	0,519	9,25	0,492	4,67	0,472	3,03	0,438	1,840	5,10	5,06
21	0,530	17,96	0,513	9,27	0,486	4,69	0,466	3,06	0,434	1,857	5,12	5,10
22	0,521	18,02	0,506	9,31	0,480	4,72	0,461	3,08	0,430	1,874	5,15	5,15
23	0,516	18,11	0,500	9,33	0,474	4,74	0,455	3,11	0,425	1,896	5,19	5,19
24	0,509	18,21	0,493	9,38	0,468	4,77	0,449	3,15	0,421	1,914	5,23	5,24
25	0,502	18,28	0,486	9,42	0,462	4,80	0,444	3,17	0,417	1,932	5,26	5,29
26	0,495	18,35	0,480	9,45	0,456	4,82	0,438	3,21	0,413	1,951	5,29	5,33
27	0,488	18,49	0,473	9,49	0,449	4,86	0,432	3,24	0,409	1,970	5,33	5,38
28	0,480	18,60	0,466	9,54	0,443	4,89	0,426	3,28	0,404	1,994	5,38	5,42
29	0,473	18,75	0,458	9,61	0,436	4,93	0,420	3,31	0,402	2,004	5,42	5,47

Как видно, на всех частотах эксперимента отмечается характерный для омического вклада рост ε'' с повышением температуры. Согласно критерию (10) при этом должно соблюдаться постоянство произведения $\varepsilon'' f$ на разных частотах при данной температуре. Судя по значениям $\varepsilon'' f$ в Таблице 4, это условие выполняется с приемлемой точностью.

Таблица 4

Произведение $\varepsilon'' f$ по данным Таблицы 3 на разных частотах f (МГц) и температурах t ($^{\circ}$ С).

t	0,5	1,0	2,0	3,0	5,0
20	8,9	9,3	9,3	9,1	9,2
25	9,1	9,4	9,6	9,5	9,7
30	9,4	9,7	10,0	10,1	10,2
35	9,8	10,0	10,4	10,7	10,8
40	10,4	10,4	11,0	11,5	11,8

Выравнивание (10) посредством логарифмирования

$$\lg \varepsilon'' = \lg \gamma' - \lg f, \quad (\gamma' = 1.8 \cdot 10^{12} \gamma). \quad (22)$$

Позволяет аппроксимировать частотную зависимость удельной электропроводности ацетона линейным соотношением

$$y = a + bx \quad (b = -1). \quad (23)$$

Значения γ , найденные из совместного решения пяти условных уравнений для пяти частот при фиксированной температуре, даны в предпоследнем столбце Таблицы 3.

С другой стороны, температурная зависимость удельной электропроводности ацетона описывается уравнением

$$\gamma = \gamma_0 \exp\left(-\frac{E_{\gamma}}{RT}\right), \quad (24)$$

(E_{γ} - энергия активации электропроводности, R- газовая постоянная), или в линейной форме

$$\ln \gamma = \ln \gamma_0 - \frac{E_{\gamma}}{RT}. \quad (25)$$

Оценка входящих в (25) постоянных коэффициентов γ_0 и E_{γ} по методу наименьших квадратов дала

$$\gamma = 6,945 \cdot 10^{-5} \exp\left(-\frac{1525,35}{RT}\right) \text{ и}$$

$$E_{\gamma} = 1525,35 \frac{\text{кал}}{\text{моль}}. \quad (26)$$

Значения γ , вычисленные по (26), даны в последнем столбце Таблицы 3. Расхождения между двумя наборами γ не превышают 1%, что в целом, свидетельствует о достаточно

высокой самосогласованности первичных экспериментальных данных в рамках дифференциальной модификации резонансного метода измерения адmittанса в диапазоне частот $10^5 \div 10^6$ Гц.

В рамках поставленной задачи выполнены аналогичные оценки с использованием доступных литературных данных по вязкости [4] и временам диэлектрической релаксации τ [3] ацетона, согласно которым соответствующие

температурные зависимости описываются соотношениями:

$$\eta(nyaz) = 21,225 \cdot 10^{-5} \exp\left(\frac{1583,71}{RT}\right)$$

и $E_\eta = 1583,71 \frac{\text{кал}}{\text{моль}}$, (27)

$$\tau(\text{сек}) = 1,94 \cdot 10^{-13} \exp\left(\frac{1650,0}{RT}\right)$$

и $E_\tau = 1650,0 \frac{\text{кал}}{\text{моль}}$. (28)

Таблица 5

Экспериментальные [3] и вычисленные по (27) вязкости η (пуаз) ацетона при разных температурах t (^0C)

t	-20	-10	0	10	20	30	40	50	60
$10^2 \eta_{\text{эксп}}$	0,500	0,442	0,395	0,356	0,322	0,293	0,268	0,246	0,230
$10^2 \eta_{\text{выч}}$	0,495	0,439	0,393	0,355	0,322	0,294	0,271	0,250	0,232
$\Delta, \%$	-1,0	-0,7	-0,5	-0,3	0,0	+0,3	+1,1	+1,6	+0,9

Таблица 6

Экспериментальные [4] и вычисленные по (29) времена диэлектрической релаксации τ (сек) ацетона при разных температурах t (^0C)

t	1	20	40
$10^{12} \tau_{\text{эксп}}$	3,98	3,34	2,76
$10^{12} \tau_{\text{выч}}$	4,02	3,30	2,75
$\Delta, \%$	+1,0	-1,2	-0,4

В Таблицах 5 и 6 экспериментальные значения η, τ сравниваются с вычисленными. Там же указаны расхождения между опытом и оценкой, не превышающие около 1% в обоих случаях.

Результаты обработки собственных и литературных данных показывают, что в случае ацетона имеет место следующее соотношение между энергиями активации электропроводности E_γ , вязкости E_η и диэлектрической релаксации E_τ :

$$E_\tau \geq E_\eta \geq E_\gamma. \quad (29)$$

При сравнимых значениях энергий активаций для трех явлений переноса отмечается слабо выраженная тенденция к понижению в

указанной последовательности. Учитывая, что перенос заряда является трансляционным процессом, отсюда можно заключить о существовании сильной корреляции между поступательной и вращательной подвижностью в ацетоне.

Согласно модели Френкеля, элементарный акт релаксации осуществляется посредством однократного вращательного переброса одиночной молекулы через потенциальный барьер, созданный соседними молекулами. В современных версиях эта модель дополнена концепцией свободного объема как необходимого условия реализации переброса. Предполагается, что трансляционный перенос молекулы завершается при достижении вакансии актом вращательной переориентации на угол $2\pi/3$ радиан [7-9]. Соответственно, энергия, необходимая для создания вакансии, определяется как разность энергий активации для трансляционной и вращательной диффузии. Такая интерпретация находится в очевидном противоречии с экспериментальным доказательством равенства этих двух энергий для ацетона.

Трансляционно-вращательное взаимодействие постулируется и в одночастичной модели Дебая, согласно которой элементарный акт релаксации трактуется как последовательность многократных малоугловых поворотов полярной молекулы в вязкой среде. Предложенная Дебаем формула связывает время диэлектрической релаксации молекулы с ее объемом и вязкостью жидкости. Примечательно, что единственным объектом, для которых формула Дебая подтвердилась (по порядку величины) оказались такие разбавленные растворы полярных жидкостей, для которых выполняется условие:

$$V_{\text{да}} \geq V_{\text{дна}},$$

где V - объем молекулы, подстрочные индексы "да" и "дна" относятся соответственно к диэлектрически активным и диэлектрически неактивным молекулам. На качественном уровне здесь прослеживается определенное сходство с кластерной моделью, учитывающей следующие особенности:

- 1) Энергия взаимодействия кластеризованных молекул превышает энергию теплового движения. Устойчивость кластера может быть нарушена только при оптимальном сближении одной или нескольких молекул кластера с посторонними молекулами, что приводит к распаду кластера с последующим его восстановлением.
- 2) Большинство актов распада-восстановления являются диэлектрически неактивными. Вклад в ориентационную поляризацию создают лишь те акты, в результате которых изменяется проекция эффективного дипольного момента кластера на выделенное направление.
- 3) Диэлектрическая релаксация кластера является коллективным процессом и включает следующие стадии: а) распад кластера; б) переориентацию освободившихся молекул; в) восстановление кластера с новым направлением эффективного диполя. Вторая стадия является наиболее длительной, так как определяется размером и формой молекул. Это обстоятельство обуславливает существование двух различных шкал скоростей для процессов распада-восстановления кластеров. Более быстрая шкала соответствует диэлектрически неактивным кластерам, которые можно рассматривать как аналог вышеотмеченных малых молекул неполярных растворителей.
- 4) В отличие от диэлектрической релаксации, в других явлениях переноса отсутствует такая многоступенчатость кластерной динамики. Именно этим объясняется наблюдаемая последовательность $E_\gamma \leq E_\eta \leq E_\tau$. В случае воды все три энергии активации близки друг к другу. Но по мере увеличения размеров и асимметрии молекул нарастает различие между значениями E_τ и двух других энергий активации. Так, в случае нормального бутилового спирта

$$E_\eta = 4500 \frac{\text{кал}}{\text{моль}}, \quad E_\tau = 7100 \frac{\text{кал}}{\text{моль}}.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении можно утверждать, что ацетон характеризуется сильной корреляцией вращательной и трансляционной динамики, что проявляется в сравнимости энергий активации для процессов переноса электрических зарядов, массы и электрических диполей. Экспериментально доказанное наличие такой корреляции дает основание предполагать существование достаточно выраженной и устойчивой кластеризации молекул ацетона. Учитывая большой электрический дипольный момент ацетона, основным фактором, управляющим кластеризацией, следует, по-видимому, считать диполь – дипольные взаимодействия. В этой связи есть основания полагать, что наблюдаемая в диэлектрическом спектре ацетона единственная область дисперсии-поглощения возникает в результате суперпозиций индивидуальных кластерных вкладов. Добавки высокополярных жидкостей способны существенно расширить частотную протяженность диэлектрического спектра ацетона, что позволит создать более благоприятные условия для расчета диэлектрических параметров.

1. D.Ritter, E.Zeldov, K.Weiser. *Diffusion Length Measurement in a-Si:H Using the Steady State Photo carrier Grating Technique*, *J. Non-Crystal. Solids*, 97-98 (1987) 571-574.
2. А.Я.Кипнис. *Кластеры в химии*, Москва, (1981) 64.
3. Я.Ю.Ахадов. *Диэлектрические параметры чистых жидкостей*, Москва, (1999) 854.
4. А.А.Чернов. *Физика кристаллизации*, Москва, (1983) 64.
5. C.J.F.Böttcher, P.Bordwijk. *Theory of Electric polarization II* Elsevier scientific Publishing Co., Elsevier, Amsterdam, (1978) 250-253.
6. М.Ф.Вукс. *Электрические и оптические свойства молекул и конденсированных сред*, Ленинград, (1984) 334.
7. P. Hochtl, S. Boresch, O.Steinhauser. *Dielectric properties of glucose and maltose solutions*. *Journal of Chemical Physics*, №22 (2000) 810-821.
8. K.Fuchs, U.Kaatze. *Molecular Dynamics of Carbohydrate Aqueous Solutions. Dielectric Relaxation as a Function of Glucose and Fructose Concentration*. *Journal of Chemical Physics*, №10 (2001) 36-42.
9. M.Juanger, I.Krest, M.J.Schouning. *Biosensoric detection of the cysteine sulphoxide alliin*, *Sensors and Actuators, Chemical*, 95 (2003) 297-302.

ASETONUN MEZONIZAMLI DIELEKTRIK SPEKTROSKOPİYASI

S.T.ƏZİZOV, K.Ə. ZÜLFÜQARZADƏ, O.Ə. ƏLİYEV, Ç.O. QACAR

Asetonun clasterlənmiş molekullarının translational-fırlanma kinetikasının dielektrik təzahürləri öyrənilib. Bu komponentlərin nisbi əhəmiyyətli bir meyar kimi üç daşınma hadisələrinin aktivasiya enerji müqayisəsi seçilmişdir: keçiricilik (E_τ), özlü axımı (E_η) və dielektrik relaksasiyası (E_r). Təcrübə müəyyəyən edilmiş ardıcılılıq $E_\tau \geq E_\eta \geq E_r$ asetonun clasterlənmiş molekulların translational – fırlanma dinamikası baxımından müzakirə edilir.

DIELECTRIC SPECTROSCOPY OF MESAORDER IN ACETONE

S.T.AZIZOV, K.E.ZHULFUGARZADE, O.A.ALIEV, Ch.O.KADJAR

Dielectric properties of translation-rotation dynamics of acetone molecular clusters have been investigated. The comparison of activation energy of three transport phenomenon-electro conductivity (E_τ), viscosity (E_η) and dielectric relaxation (E_r) has been chosen as a criterion for relative importance of these components. It has been found experimentally that $E_\tau \geq E_\eta \geq E_r$. This fact has been discussed with the framework of translation-rotation dynamics of acetone molecular clusters.

Редактор: акад. Т.Джафаров

УДК 621.38

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ InSe

А.Г.КЯЗЫМ-ЗАДЕ¹, М.КАРАБУЛУР², А.Х.ДИНЧЕР², В.М.САЛМАНОВ¹,
М.А.ДЖАФАРОВ¹, А. Г.ГУСЕЙНОВ¹, Р.М.МАМЕДОВ¹, А.М.АЛИЕВА³

Бакинский Государственный Университет¹

AZ1148, Баку, ул. З.Халилова, 23

Карский Университет²

Турция 36100

Институт Физики НАН Азербайджана³

AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавида, 131

vagif_salmanov@yahoo.com

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

Исследованы электрические и оптические характеристики наночастиц *InSe*, выращенных методом гидрохимического осаждения из раствора, содержащего селеносульфат натрия и хлорид индия. В качестве подложек были выбраны стекло и кристаллы *GaSe* и *InSe*, выращенные методом Бриджмена. При помощи дифракционного анализа рентгеновских лучей (XRD) и атомного силового микроскопа (AFM) проведены исследования морфологии и структуры полученных образцов. Определены ширина запрещенной зоны ($E_g=1,6\text{эВ}$) и энергии активации примесных уровней ($0,41\text{эВ}$, $0,54\text{эВ}$ и $0,58\text{эВ}$). Исследованы ВАХ структуры *InSe*–*InSe* и *InSe*–*GaSe*–*InSe*, которые обладают диодной характеристикой.

Ключевые слова: наночастицы, селенид индия, поглощение, вольт-амперная характеристика.

ВВЕДЕНИЕ

Исследования размерных квантовых явлений в малоизученных, и в тоже время перспективных слоистых полупроводниках типа A^3B^6 , открывают большие перспективы для конструирования на их основе новых приборов с широким спектром функциональных возможностей. Ионно-ковалентная связь между атомами в слоях и слабое Ван-дер-ваальсовское взаимодействие между ними обуславливают сильную анизотропию их физических свойств и являются основной причиной наблюдения ряда эффектов, не свойственных другим анизотропным полупроводникам. С другой стороны, благодаря наличию малой плотности оборванных связей на поверхности скола (менее 10^{10}cm^{-2}), слоистые полупроводники могут использоваться в качестве твердотельных подложек [1] для

формирования квантовых точек, выращивания фуллеров, полимеров, а также для получения ван-дер-ваальсовой эпитаксии в изготовлении солнечных элементов. В современных оптоэлектронных приборах значительную роль играют структуры с гетеропереходами (ГП). Развитие данного направления электроники требует расширения класса используемых материалов. Как показывают исследования [2-4], слоистые кристаллы группы $A^{III}B^{VI}$, типичным представителем которых является моноселенид индия (*InSe*), являются перспективными материалами современной оптоэлектроники. Поверхность селенида индия имеет низкую концентрацию дефектов, высокую степень инертности. Фотопреобразователи видимого и ближнего инфракрасного (ИК) диапазонов на основе гетеропереходов n -*InSe*– p -*InSe* привлекают внимание исследователей, в первую очередь, ввиду их высокой радиационной стой-

кости [5, 6]. Однако известно, что слоистые кристаллы, а особенно InSe, обладают большим количеством структурных дефектов, в том числе, дефектами упаковки и наличием плоских дислокаций [7]. Чрезмерное количество этих дефектов негативно влияет на фотоэлектрические характеристики ГП, а соответственно и на приборы изготовленные на их основе. В наночастицах InSe лишь небольшая часть из них будет содержать примеси, в то время как подавляющее большинство окажется химически чистым.

В работе [8] проведено комплексное исследование структуры и физических свойств наночастиц InSe. Показано, что уменьшение размеров наночастиц от 75нм до 6,5нм приводит к увеличению ширины запрещенной зоны от 1,25эВ до 1,55эВ. С ростом размеров наночастиц (6,5нм÷19,5нм) происходит увеличение интенсивности фотолюминесценции и сдвиг его максимума в сторону длинных волн. Д.Ф.Келли и др. в своих работах [9,10] показали, что InSe является более эффективным материалом для солнечных батарей. В отличие от кремния, наночастицы которого получить не просто, селенид индия весьма перспективен для создания солнечных элементов именно из наночастиц.

Как показали проведенные нами исследования метод химического осаждения из водных растворов позволяет получать полупроводниковые нанокристаллы намного меньшего размера, чем методы молекулярно-лучевой эпитаксии или литографии. Зарождение зародышей и их рост в растворе при химическом осаждении приводит к форме нанокристаллитов, близкой к сферической, в то время как нанесение пленок методами молекулярно-лучевой эпитаксии или электрохимическим осаждением – к несферической.

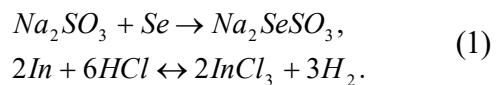
Нами исследованы электрические и оптические свойства наноразмерных структур селенида индия. Используемые при этом наночастицы были получены методом химического осаждения из раствора, отличались простотой и дешевизной технологии, высокой воспроизводимостью. Предварительные исследования показывают, что эти нанострукту-

ры могут иметь также прикладное значение для изготовления диодных структур, эффективных источников света и преобразователей электромагнитного излучения.

МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ InSe И ИХ СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ

Наночастицы InSe были получены методом химического осаждения (M-CBD- *chemical bath deposition method*). В качестве подложек нами были выбраны стекло и кристаллы GaSe и InSe, полученные методом Бриджмена. Кристаллические подложки имели удельное сопротивление $\rho \sim (10^3 \div 10^5)$ Ом·см, а в качестве проводящих контактов использовалась серебряная паста. Размеры пластинчатых кристаллических подложек составляли 10x6x0,5мм³. Стеклянные подложки предварительно тщательно были очищены в растворе дихромата калия и серной кислоты, затем последовательно промывались в хлористо-водородной кислоте, ацетоне и многократно в дистиллированной воде, а после промывки высушивались в вакуумном сушильном шкафу.

Тонкие пленки InSe были получены методом гидрохимического осаждения из раствора, содержащего сelenosульфат натрия (Na_2SeSO_3) и хлорид индия ($InCl_3$). В качестве первоначального сырья использованы особо чистые вещества (99, 99998):Se,In, $Na_2S_2O_3$ и HCl. Вначале синтезировались соединения Na_2SeSO_3 и $InCl_3$ по нижеследующим реакциям:



В растворах Na_2SeSO_3 и $InCl_3$ подложки выдерживались в течение от одной до десяти минут. Далее выращивание наночастиц соединения InSe производилось использованием четырех емкостей с жидкостями. В первой находился раствор хлорида индия, во второй и четвертой дистиллированная вода, а в третьей раствор сelenosульфата натрия.

На Рис.1 приведены дифрактограммы (XRD- Radiation: CuK α , $\lambda=1.54178\text{\AA}$ SSFOM: F17-6(0.05.10.60)) кристалла GaSe, наночастиц

InSe, на кристаллической подложке GaSe, соответственно. Рентгеноструктурным

анализом установлено, что наночастицы InSe имеют гексагональную структуру.

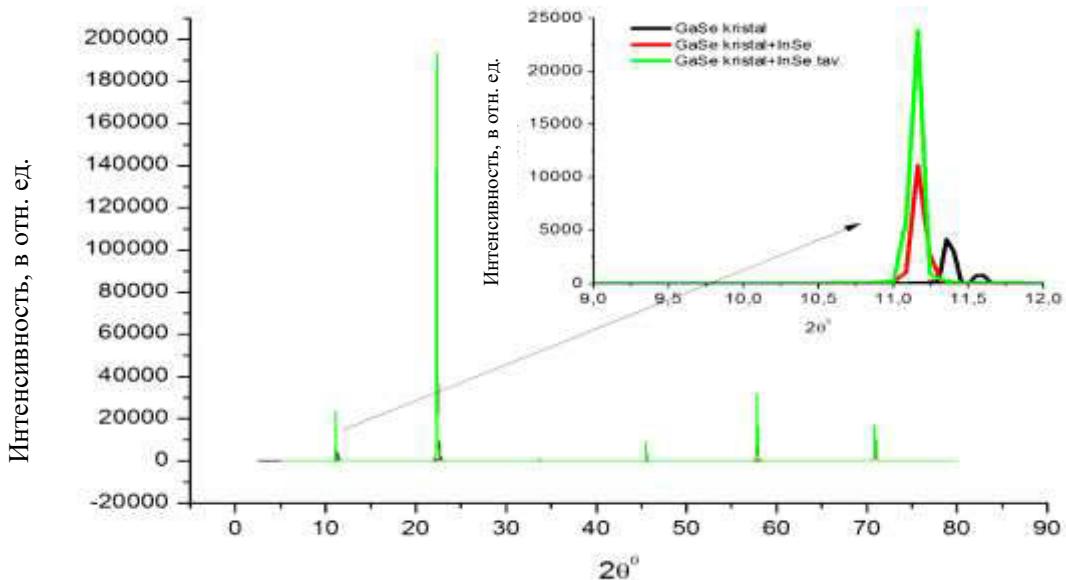


Рис.1
Дифрактограммы (XRD) наночастиц *InSe*

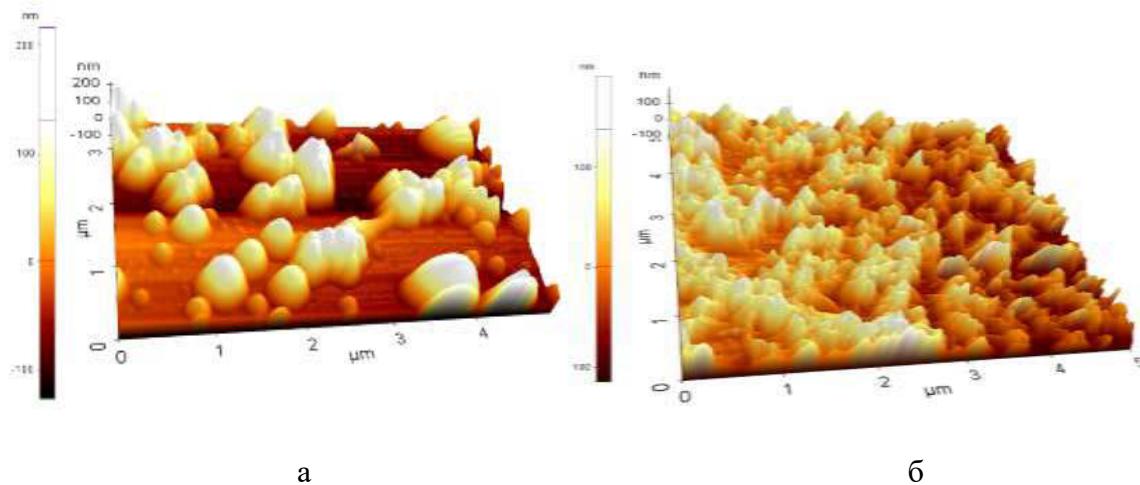
Таблица 1

Положения (2θ) пиков дифрактограммы наночастиц *InSe*.

2-Theta	d(A)	BG	Height	I%	Area	I%	FWHM	XS(A)
11.060	7.9935	43	6844	18.1	59049	10.7	0.147	744
16.603	5.3349	32	71	0.2	1652	0.3	0.396	210
22.259	3.9904	67	37912	100.0	554108	100.0	0.248	356
28.473	3.1322	33	48	0.1	934	0.2	0.331	260
33.658	2.6606	23	807	2.1	6937	1.3	0.146	779
39.503	2.2794	14	49	0.1	759	0.1	0.263	346
45.420	1.9952	27	5540	14.6	56795	10.2	0.174	603
57.721	1.5958	84	19737	52.1	174802	31.5	0.151	806
58.617	1.5736	35	103	0.3	1569	0.3	0.259	381
70.817	1.3294	76	15633	41.2	142057	25.6	0.154	828
71.801	1.3136	46	69	0.2	1232	0.2	0.304	342

В Таблице 1 приведены положения (2θ) пиков дифрактограммы наночастиц *InSe*. Идентификация дифракционных линий для наночастиц *InSe* полученных нами и кристаллов *InSe* представленных в работе [11], находятся в удовлетворительном согласии.

На Рис. 2 представлены AFM изображения наночастиц *InSe* на стеклянной подложке (а) и на подложке из GaSe (б). Как видно из рисунков, гомогенное распределение частиц на представленных рисунках не наблюдается.



AFM изображения наночастиц *InSe* на стеклянной подложке (а) и на подложке из *GaSe* (б).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На Рис. 3 представлен спектр поглощения трехслойной структуры, состоящей из слоя наночастиц *InSe*, тонкой пленки *GaSe* и проводящего стекла. На основе спектральной зависимости определены ширина запрещенной зоны наночастиц *InSe*. Учитывая, что *InSe* является прямозонным полупроводником, из зависимости $\alpha^2 \sim f(hv)$ определена ширина запрещенной зоны наночастиц *InSe*, которая оказалась равной 1,6эВ. Эта величина ширины запрещенной зоны наночастиц оказывается намного больше, чем E_g для кристаллов *InSe* ($E_g \sim 1,23$ эВ).

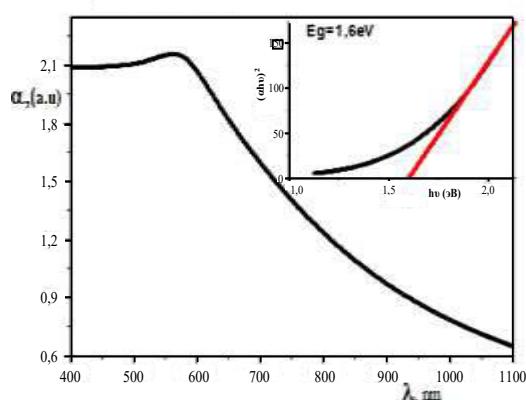


Рис.3

Спектр поглощении наночастиц *InSe* на проводящем стекле с пленкой *GaSe*.

На Рис. 4 представлен спектр поглощения трехслойной структуры, состоящей из слоя наночастиц *InSe*, тонкой пленки *GaSe* и проводящего стекла после термического отжига при 450К в течении 5 часов. Как видно из рисунка, в области 700÷1000нм после термического отжига на спектре появляется полоса поглощения, обусловленная оптическим переходом с энергией 1,27 эВ. Эта энергия близка с шириной запрещенной зоны монокристаллического *InSe*. Следовательно, термический отжиг наночастиц *InSe* на тонкой пленке *GaSe* приводит к реструктуризации наночастиц *InSe*, т.е. происходит увеличение размеров наночастиц за счет слияния наночастиц в кристаллическую структуру. Об этом также свидетельствует данные работы [8] в которой показано, что с увеличением размера наночастиц *InSe* от 10нм до 75нм ширина запрещенной зоны изменяется от 1,6эВ до 1,26эВ.

На Рис.5 даны зависимости проводимости наночастиц *InSe* на подложке *InSe* (а) и *GaSe* (б) от температуры. Измерительные контакты были нанесены на поверхности наноструктур. Зависимость проводимости *InSe* на подложке *InSe* от температуры имеет экспоненциальный характер, с энергией активации примесных уровней $E_a=0,58$ эВ в интервале температуры 300÷360К, а на подложке *GaSe* с энергией активации $E_a=0,41$ эВ, и $E_a=0,54$ эВ в интервале температуры 180÷360К. Наблюданная разница в значениях энергий активации

наночастиц, нанесенных на подложках InSe и GaSe, может быть связана с неодинаковым образованием наночастиц на этих подложках.

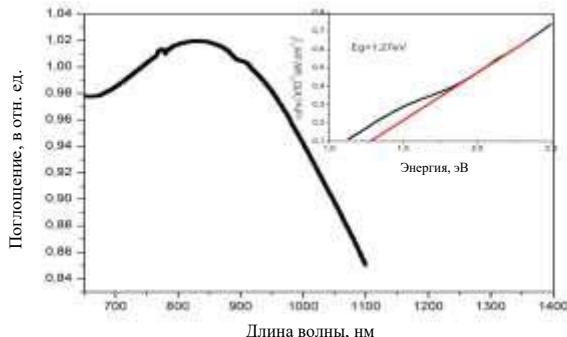


Рис.4

Спектр поглощении наночастиц *InSe* на основе кристаллической пленки *GaSe* после термического отжига.

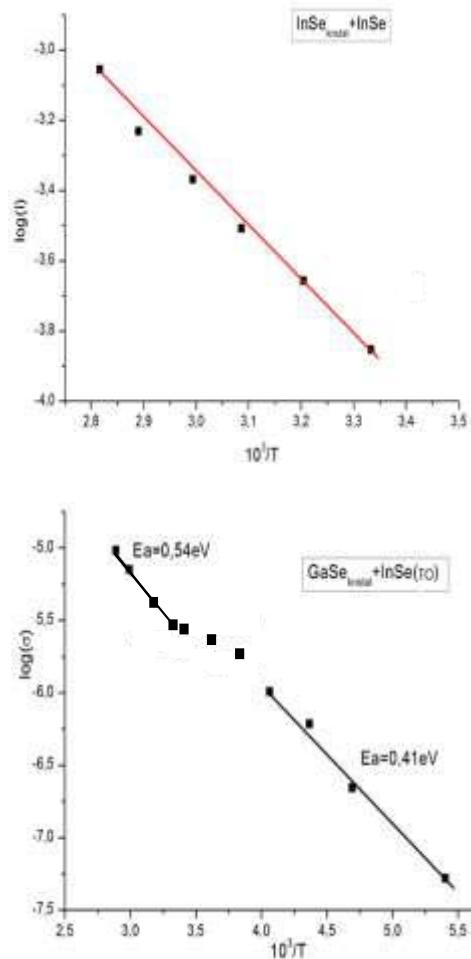


Рис.5

Зависимость проводимости наночастиц *InSe* на подложке *InSe* и *GaSe* от температуры.

На Рис. 6. приведены ВАХ наноструктур *In-InSe_{нано}-In* на свету (а, б) и в темноте (с, д), в режимах продольном и поперечном направлении электрического поля по отношению к нормали поверхности подложки. Как видно из рисунка, в темноте ВАХ носит линейный характер. Однако, под действием света, ВАХ становится нелинейной. Это может быть связано с локализацией носителей заряда на уровнях прилипания, в результате которого возникают токи ограниченные объемными зарядами (ТООЗ) [12]. Следует отметить, что наноструктура *InSe* обладает высоким удельным сопротивлением, т.к. при напряжении 600В через образец проходит ток порядка 10^{-9}A . Следовательно, представляется возможным более глубокое изучение электрооптических явлений на наноструктурах *InSe*, по сравнению с кристаллами.

На Рис.7 и Рис. 8 приведены характерные кривые прямых ветвей ВАХ тонкопленочных диодных структур при различных температурах. Как следует из этих графиков, кривые ВАХ изучаемых диодов в отдельных участках могут быть описаны в виде $I \sim V^n$, где величина n меняется в зависимости от температуры и напряжения от 2 до 5, причем с понижением температуры крутизна кривых увеличивается. Следует отметить, что характерным для данного семейства кривых является уменьшение энергии активации тока с увеличением приложенного напряжения. В области напряжений до 1,8В ВАХ структур определяются в основном контактными явлениями, а при относительно высоких значениях внешнего напряжения наблюдаются токи, ограниченные объемными зарядами (ТООЗ).

ВАХ структуры *In-InSe_{касп}-InSe_{пленка}-In* имеет выпрямляющий характер, а структура *InSe_{пленка}-GaSe_{касп}-InSe_{пленка}* имеет симметричная ВАХ (Рис.9).

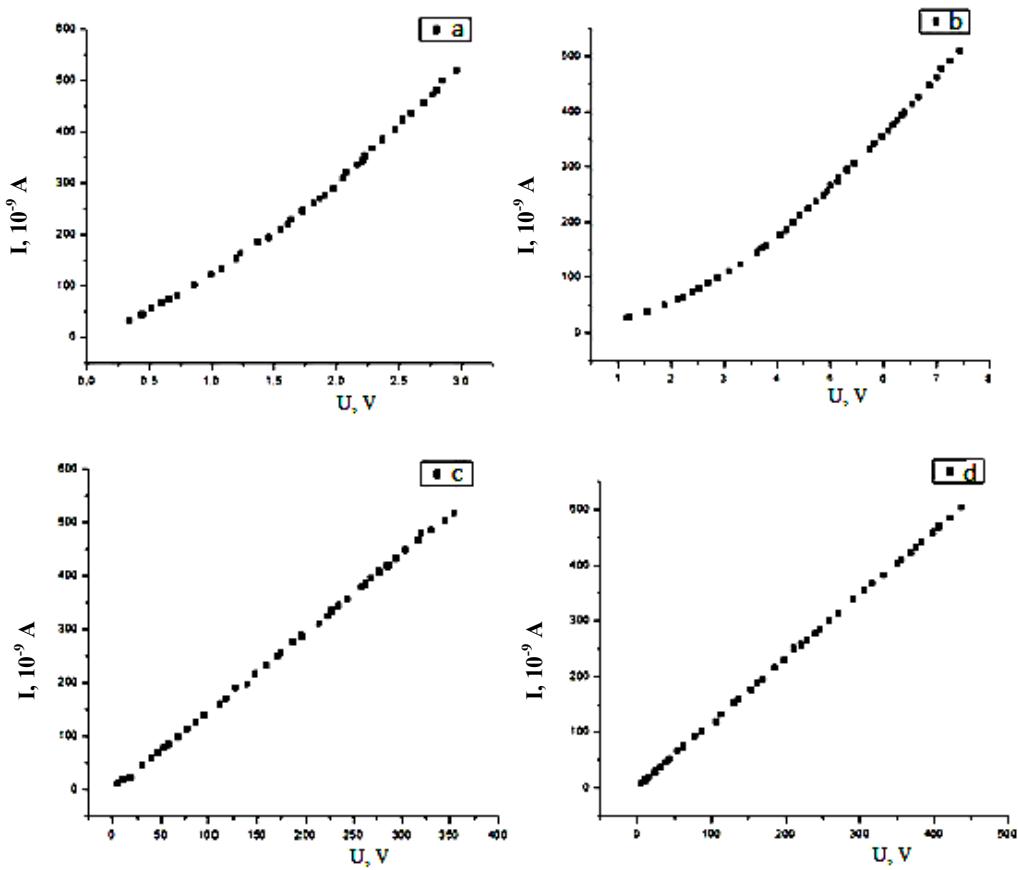


Рис.6

BAX структур In-InSe_{nano}-In на свету (а,б) и в темноте (с,д) в продольном (а,с) и поперечном (б,д) направлении электрического поля по отношению к нормали поверхности подложки

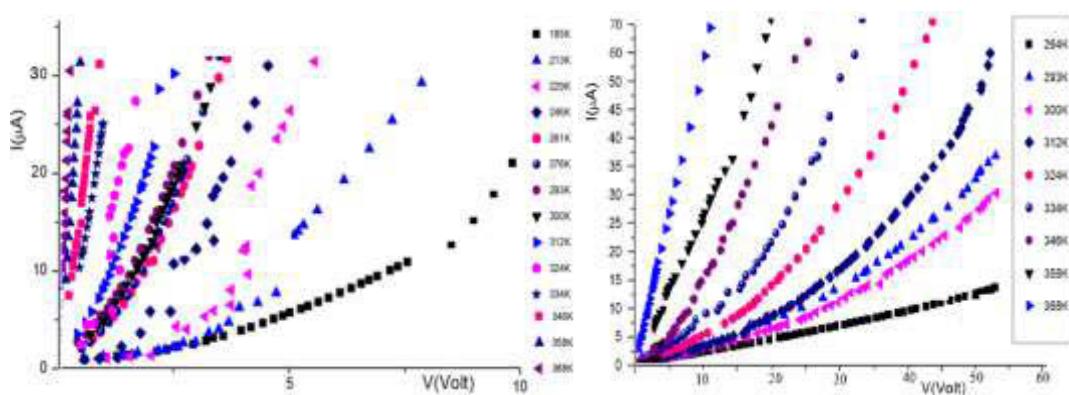


Рис.7
BAX пленок In-InSe-In при различных температурах

Рис.8
BAX структуры In-InSe_{крип}-InSe_{пленка}-In при различных температурах

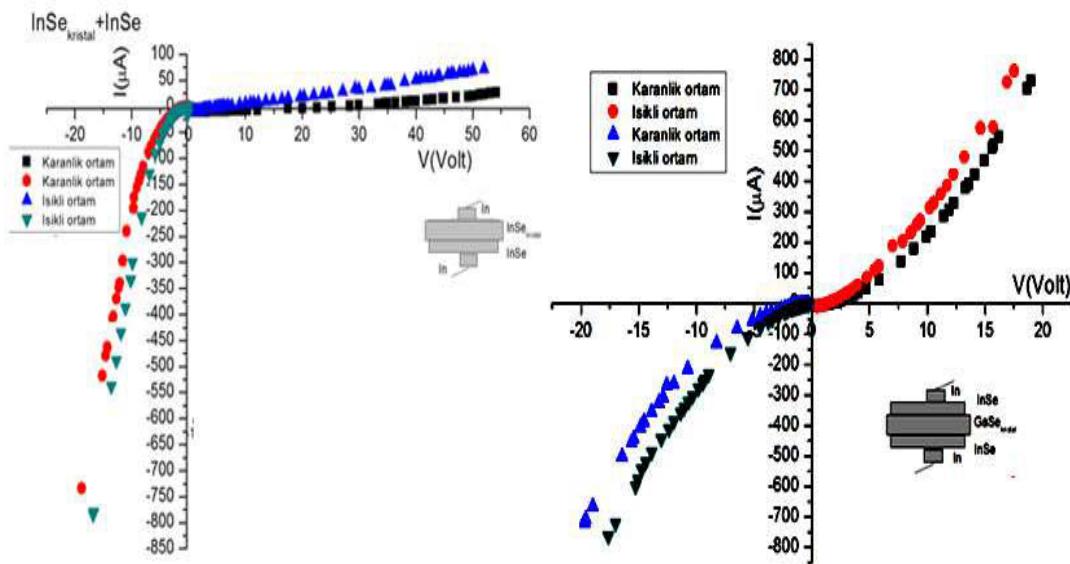


Рис.9
ВАХ структуры $\text{InSe}_{\text{криз}}-\text{InSe}_{\text{пленка}}$ и структуры $\text{InSe}_{\text{пленка}}-\text{GaSe}_{\text{криз}}-\text{InSe}_{\text{пленка}}$

Как показывают экспериментальные результаты, ВАХ в области протекания тока, ограниченного объемными зарядами (ТООЗ) после полного (предельного) заполнения ловушек, инжектированными носителями описывается выражением:

$$J = \frac{\varepsilon \mu \alpha^2 (V - V_{\text{пзл}})}{L^3}, \quad (2)$$

здесь $V_{\text{пзл}}$ – напряжение предельного заполнения ловушек; n_t – концентрация (плотность) ловушек. Поскольку, квадратичная зависимость плотности протекающего через образец тока инжекции от приложенного внешнего напряжения наблюдается лишь при условии $V \gg V_{\text{пзл}}$, по этой точке ВАХ, при $V_{\text{пзл}} = 7\text{ В}$ вычислена концентрация заполненных ловушек, которая равна $1,27 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$.

В рассмотренных нами условиях квадратичная зависимость плотности тока инжекции от внешнего напряжения наблюдается лишь при условии

$V_{\phi} \gg V_{\text{пзл}}$, ($V_{\phi} = V - V_0$). Положение ловушек и плотность состояний на единичный интервал энергии определены из изучения температурных зависимостей тока. При заполненных ловушках концентрация носителей в зоне проводимости при эффективном напря-

жении близком к $V_{\text{пзл}}$ описывается экспоненциальным выражением. Из значения плотности тока инжекции при различных температурах (рис.5) определены граничные значения положения уровней ловушек в запрещенной зоне $0,41\text{ эВ}$. При повышении температуры до $260\text{-}300\text{ К}$ энергия активации тока, уже при малых эффективных напряжениях, с температурой уменьшается до $0,13\text{ эВ}$. Такой характер зависимости можно связать с уменьшением захвата ловушками инжектированных носителей.

При высоких температурах ($T=360\text{K}$) наблюдается зависимость в виде $I \sim V_{\phi}^n$ с величиной $n < 2$, что объясняется существенным вкладом в проводимость равновесных свободных носителей, которые на начальном участке кривой ВАХ, обеспечивает подчинению закону Ома. Энергетическая глубина залегания примесного уровня, проявляющегося на данном участке, равна $0,54\text{ эВ}$. Таким образом, эффективный захват инжектированных носителей в тонкопленочных диодах на основе InSe , осажденных из раствора происходит лишь при $T < 250\text{K}$. Такой результат является следствием достаточно точной компенсации глубоких уровней с $E_t = 0,54\text{ эВ}$. В данном случае донорами, ком-

пенсирующими глубокие ловушки, служили мелкие уровни вакансии селена, концентрацией которых управляли, изменения содержание компонентов в растворе и подбором оптимального режима осаждения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наночастицы *InSe* на стеклянной подложке и на подложке из кристаллической пластиинки *GaSe* и *InSe* выращены методом гидрохимического осаждения из раствора, содержащего селеносульфат натрия и хлорид индия. Результаты рентгеноструктурного и микроструктурного анализа показывают, что наночастицы

InSe обладают гексагональной структурой и на кристаллических подложках образуется наночастицы с дискретно-сферическими структурами. Установлено, что с увеличением размеров наночастиц *InSe* от 10нм до 75нм ширина запрещенной зоны изменяется от 1,6эВ до 1,26эВ. В наночастицах выявлены примесные уровни с энергиями активации 0,41эВ, 0,54эВ и 0,58эВ. Определено, что ТООЗ обусловлены центрами прилипания с концентрацией $1,27 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$. Показано, что термический отжиг наночастиц *InSe* на кристаллах приводит к реструктуризации наночастиц.

1. H.Tu.S.Yang, V.Chikan, D.F.Kelley. Spectroscopy of GaSe Nanoparticle Aggregates, *J. Phys. Chem. B*, **108** (2004) 4701-4710.
2. Xiang-Bai Chen, David F.Kelley. Photophysics of GaSe/*InSe* Nanoparticle Heterojunctions, *J. Phys. Chem. B*, **110** (2006) 25259-25265.
3. M.B.Muradov, G.M.Eyvazova, Y.M.Yolchiev, N.G.Darvishov. Growth and some optical properties of Nanoparticles Gase, formed in the volume of glass matrix, *Int. Conf. Technical and Physical Problems in Power Engineering Ankara*, (2006) 665.
4. А.П.Бахтинов, З.Д.Ковалюк, О.Н.Сидор и др. Формированиеnanoобразований на поверхности слоистого полупроводника *InSe* в процессе термического окисления, *ФТТ*, **49** (2007) 1497-1503.
5. С.И.Драпак, З.Д.Ковалюк. Влияние буферного слоя собственного окисла селенида галлия нанометровых размеров на электрические, фотоэлектрические и излучательные свойства гетероструктур ITO-GaSe, *ФТП*, **41** (2007) 312-317.
6. F.Kh.Mirzade, K.R.Allakhverdiev, Z.Yu.Salyeva. Self-Organization of Nanometer Periodic Structures of Clusters in Solids, *J. Nanoscience and Nanotechnology*, **8** (2008) 764-767.
7. А.Г.Казым-заде, В.М.Салманов, А.А.Агаева. Детекторы оптического излучения на основе слоистых кристаллов *GaSe* и *InSe*. *Журнал технической физики*, **77** (2007) 152-129.
8. [8] Garry W.Mudd, Simon A.Svatek, Tianhang Ren, Amalia Patanè, Oleg Makarovsky, Laurence Eaves, Peter H.Beton, Zakhar D.Kovalyuk. Tuning the Bandgap of Exfoliated *InSe* Nanosheets by Quantum Confinement. *Adv.Mater.*, **25** (2013) 5714-5718.
9. Xichen Cai, James E.Martin, Lauren E.Shea-Rohwer, Ke Gong, David F.Kelley, Thermal Quenching Mechanisms in II-VI Semiconductor Nanocrystals, *J. Phys. Chem. C*, **117** (2013) 7902-7907.
10. Shuming Yang, David F.Kelley. The Spectroscopy of *InSe* Nanoparticles. *J. Phys. Chem. B*, **109** (2005) 12701-12706.
11. С.И.Драпак, С.В.Гаврилин, З.Д.Ковалюк, О.С.Литвин. Собственной Оксид селенида индия в условиях сорбции паров воды, *Прикладная физика*, **1** (2011) 115-122.
12. Т.С.Сидоренко, П.С.Смертенко, А.С.Чернова. Исследование электрофизических свойств пленок сульфида индия и слоистых структур на основе кремния, *УФЖ*, **25** (1980) 106-110.

InSe NANOZƏRRƏCİKLƏRİNİN ELEKTRİK VƏ OPTİK XASSƏLƏRİ

A.Q.KAZIMZADƏ, M.KARABULUR, A.X.DİNÇER, V.M.SALMANOV, M.A.CƏFƏROV,
A.Q.HÜSEYNOV, R.M.MƏMMƏDOV, A.M.ƏLİYEVA

Tərkibində selenosulfat natrium və indium xlorid olan məhluldan hidro-kimyəvi çökdürülmə üsulu ilə alınmış *InSe* nanozərrəciklərin elektrik və optik xassələri tədqiq olunmuşdur. Altılıq qismində Bricmen üsulu ilə alınmış *GaSe* və *InSe* kristalları və şüşə götürülmüşdür. Atom güc mikroskopunun (AFM) və rentgen şüalarının difraksiyası (XRD) üsulunun köməyi

ilə nümunələrin morfologiyası öyrənilmişdir. Nanozərrəciklərin qadağan olynmış zonasının eni ($E_g=1,6\text{eV}$) və aşqar səviyyələrin aktivləşmə enerjiləri (0,41eV, 0,54eV və 0,58eV) təyin edilmişdir. *InSe*, GaSe və şüşə altlıqlar üzərində alınmış *InSe* nanozərrəciklərinin elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılıqları, həmçinin *InSe-InSe-InSe* və *InSe-GaSe-InSe* quruluşlarının VAX-ri tədqiq olunmuşdur.

ELECTRICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF InSe NANOPARTICLES

A.G.KYAZYM-ZADE, M.KARABULUR, A.X.DINCHER, V.M.SALMANOV, M.A.JAFAROV,
A.G.HUSEYNOV, R.M.MAMEDOV, A.M.ALIEVA

The electrical and optical characteristics of nanoparticles *InSe*, grown by hydro-chemical deposition from a solution containing sodium chloride and selenosulfate indium have been experimentally investigated. The substrates have been selected glass and crystals GaSe and *InSe*, grown by Bridgman. Using X-ray diffraction analysis (XRD) and atomic force microscope (AFM) the morphology of the structure of the obtained samples have been studied. The band gap ($E_g=1,6\text{eV}$) and the activation energy of impurity levels (0,41eV, 0,54eV and 0,58eV) nanoparticles have been determined. Structures *InSe*-*InSe*-*InSe* and *InSe*-GaSe-*InSe* have been shown diode characteristic.

Редактор: акад. Т.Джафаров

УДК 621 315.61

НЕУСТОЙЧИВЫЕ ТЕРМОРЕКОМБИНАЦИОННЫЕ ВОЛНЫ В ПРИМЕСНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ДВУМЯ ТИПАМИ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА

Э.Р.ГАСАНОВ¹, Р.К.МУСТАФАЕВА², А.В.ИСЛАМЗАДЕ³

БГУ, Институт Физических Проблем¹

AZ 1148, Баку, ул. З.Халилова, 23

Институт Физики НАН Азербайджана

AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавида, 131

aygul_islamzade@mail.ru

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

В полупроводниках с однократно и двукратно отрицательно заряженными примесными центрами теоретически показано, что при наличии постоянного электрического поля и постоянного градиента температуры распространяется неустойчивая «терморекомбинационная» волна. Вычислены частота и инкремент терморекомбинационной волны. Найдена аналитическая формула для внешнего постоянного электрического поля, при котором начинается неустойчивость этой волны.

Ключевые слова: частота, инкремент, электрическое поле, градиент температуры, примесные центры.

ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] показано, что гидродинамическое движение в неравновесной плазме, в которой имеется градиент температуры $\vec{\nabla}T$, приводит к возникновению магнитных полей. В этой работе обнаружено, что плазма с градиентом температуры $\vec{\nabla}T$ обладает колебательными свойствами заметно отличными от свойства обычной плазмы. В отсутствии внешнего магнитного поля и гидродинамических движений в ней возможны поперечные «термомагнитные» волны, в которых происходит колебание только магнитного поля. Если есть постоянное внешнее магнитное поле \vec{H}_0 , то волновой вектор термомагнитных волн находится в плоскости $(\vec{H}_0, \vec{\nabla}T)$. В работе [2] теоретически проанализированы условия неустойчивости термомагнитных волн в твердотельной плазме с одним типом (электронный тип) носителей тока.

В работах [3-5] теоретически разработаны условия неустойчивости в изотропных и в анизотропных твердотельных средах с одним

типовом носителем тока. Однако условия возникновения и условия неустойчивости термомагнитных волн в примесных полупроводниках с двумя типами носителей тока остаются не ясным.

Выяснение условия неустойчивости в конкретных примесных полупроводниках имеет большой научный интерес.

В этой работе нами исследованы условия возникновения неустойчивых «терморекомбинационных» волн в ниже указанных примесных полупроводниках с двумя типами носителей тока.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

При наличии электрического поля \vec{E} , градиента концентрации электронов n_- , градиента концентрации дырок n_+ , при наличии градиента температуры $\vec{\nabla}T$, плотность электрического тока электронов и дырок имеют вид [1]

$$\vec{j}_- = -\frac{\sigma_- \vec{E}^*}{e} + \frac{\sigma_1}{e} [\vec{E}^* \vec{H}] - \alpha_- \vec{\nabla}T - \alpha'_- [\vec{\nabla}T \vec{H}], \quad (1)$$

$$\vec{j}_+ = -\frac{\sigma_+ \vec{E}^*}{e} + \frac{\sigma_{1+}}{e} [\vec{E}^* \vec{H}] - \alpha_+ \vec{\nabla} T - \alpha'_+ [\vec{\nabla} T \vec{H}], \quad (2)$$

$$E^* = \vec{E} + \frac{T}{e} \left(\frac{\vec{\nabla} n_-}{n_-} - \frac{\vec{\nabla} n_+}{n_+} \right), \quad (3)$$

$$\vec{j} = \vec{j}_- + \vec{j}_+, \quad \sigma_{\pm} = e n_{\pm} \mu_{\pm}, \quad \sigma_{1\pm} = e n_{\pm} \mu_{1\pm}. \quad (4)$$

Подставляя (1,2,3) в (4) и используя уравнения Максвелла $\text{rot} \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}$, получаем для электрического поля следующие выражение

$$\vec{E} = -\Lambda [\vec{\nabla} T \vec{H}] + \frac{c}{4\pi\sigma} \text{rot} \vec{H} + \frac{T}{e} \left(\frac{\vec{\nabla} n_-}{n_-} - \frac{\vec{\nabla} n_+}{n_+} \right) + \Lambda \vec{\nabla} T, \quad (5)$$

$$\text{здесь } \Lambda = \frac{\alpha_- - \alpha_+}{\sigma}; \quad \Lambda' = \frac{\alpha' \sigma - \alpha \sigma'}{\sigma^2}$$

$$\sigma = \sigma_+ + \sigma_-;$$

$$\sigma'_1 = \sigma_{1+} - \sigma_{1-}; \quad \alpha = \alpha_- - \alpha_+; \quad \alpha' = \alpha'_- - \alpha'_+.$$

Математический метод при получения (5) векторных уравнений (1-2-3-4) подробно представлен в работе [1]. Кроме этого в (5) не учтены квадратичные члены по магнитному полю и диффузионные члены, поскольку в полупроводниках имеет место неравенство $k_0 T \ll e E_0 \ell$ (k_0 - постоянна Больцмана, ℓ -длина свободного пробега дырок и электронов, E_0 - внешние постоянное электрическое поле).

К уравнению электрического поля (5) нужно добавить кинетические уравнения в примесных полупроводниках с учетом рекомбинации и генераций носителей тока.

Некоторые примеси в полупроводнике создают центры, которые способные находиться в нескольких заряженных состояниях. Например, атомы золота в германии могут, кроме нейтрального состояния, быть однократно положительно заряженными и однократно, двукратно и трехкратно отрицательно заряженными центрами. Таким примесным центрам соответствуют в запрещенной зоне несколько энергетических уровней. Эти энергетические уровни (примесные центры) способны захватить электроны или дырки в зависимости от их зарядовых состояний. В резуль-

тате такого захвата изменяется концентрация электронов в зоне проводимости, концентрация дырок в валентном зоне и, следовательно, электропроводность полупроводника изменяется. В разных экспериментальных ситуация эти примесные центры являются более или менее активными и, поэтому рекомбинация и генерация, в основном, происходит с определенным числом примесных центров. Например, в эксперименте [6] (результаты которого нами будет использованы в дальнейшем) активными центрами были однократно и двукратно отрицательно заряженные центры золота в германии. В присутствии электрического поля электроны и дырки получают от электрического поля энергию порядка $eE_0 \ell$, e -положительной элементарный заряд, ℓ -длина свободного пробега носителей тока. Поэтому при наличии электрического поля электроны могут преодолеть кулоновский барьер однократно заряженного центра и захватиться. В следствие теплового переброса электроны могут генерироваться из примесных центров в зоны проводимости. Количество дырок увеличивается вследствие захвата электронов примесными центрами из валентной зоны и уменьшается вследствие захвата электронов из примесных центров дырками. Разные вероятности генерации и рекомбинации носителей тока приводят к изменению концентраций электронов и дырок в полупроводниках. Уравнения кинетики электронов и дырок в вышеуказанном полупроводнике подробно изложены в работе [7] и имеют следующий вид:

$$\frac{\partial n_-}{\partial t} + \text{div} \vec{j}_- = \gamma_-(0) n_{1-} N_- - \gamma_-(E) n_- N = \left(\frac{\partial n_-}{\partial t} \right)_{rek}, \quad (6)$$

$$N_0 = N_- + N_+ = \text{const} \quad n_{1-}^0 = \frac{n_{1-}^0 N_0}{N_-^0}, \quad (7)$$

здесь N_0 - общая концентрация однократно отрицательно заряженных N и двукратно отрицательно заряженных N_- центров. n_{1-} - характерная концентрация, найденная из условия

$$E_0 = 0, \quad \left(\frac{\partial n_-}{\partial t} \right)_{rek} = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_+ = \gamma_+(E)n_{1+}N - \gamma_+(0)n_+N_- = \left(\frac{\partial n_+}{\partial t} \right)_{rek} \quad (9)$$

$$n_{1+} = \frac{n_+^0 N_-^0}{N_0}$$

В уравнениях (6-10) $\gamma_-(0)$ - коэффициент испускания электронов двукратно отрицательно заряженными центрами в отсутствии электрического поля. $\gamma_-(E)$ - коэффициент захвата электронов однократно отрицательно заряженными центрами, $\gamma_+(0)$ - коэффициент захвата дырок двукратно отрицательно заряженными центрами. Изменение со временем двукратно отрицательно заряженных ловушек определяет изменение однократно отрицательно заряженными центрами. Поэтому уравнение, определяющее изменения центров со временем, имеет вид:

$$\frac{\partial N_-}{\partial t} = \left(\frac{\partial n_+}{\partial t} \right)_{rek} - \left(\frac{\partial n_-}{\partial t} \right)_{rek}. \quad (10)$$

Для получения дисперсионного уравнения $\omega(k)$ система уравнений (5-6-7-9-10) с учетом уравнений Максвелла

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -c \operatorname{rot} \vec{E}, \quad (11)$$

(с- скорость света) должны быть решены совместно. Для этого будем линеаризовать системы (5-10) следующим образом.

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \vec{E}_0 + \vec{E}; \quad n_\pm = n_\pm^0 + n'_\pm; \quad \vec{\nabla}T = const, \\ (\vec{E}', n'_\pm) &\sim e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}, \\ \vec{E}' &<< \vec{E}_0; \quad n'_\pm << n_\pm^0, \end{aligned} \quad (12)$$

где \vec{k} – волновой вектор, ω - частота волны.

Поставим (11) в (5), получим

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\frac{c\Lambda'}{\omega} [\vec{\nabla}T[\vec{k}\vec{E}']] + \frac{ic^2}{4\pi\omega\sigma} [\vec{k}[\vec{k}\vec{E}']] + \\ &+ \frac{iE_1\vec{k}}{k} \left(\frac{n'_-}{n_-^0} - \frac{n'_+}{n_+^0} \right) + \Lambda \vec{\nabla}T. \end{aligned} \quad (13)$$

Линеаризуя (10), получим

$$N'_- = \frac{N^0 \lambda \frac{\vec{E}' \vec{E}_0}{E_0^2} + \omega_-(E_0)n'_- - \omega_+(0)n'_+}{\nu - i\omega}, \quad (14)$$

здесь

$$\begin{aligned} \nu &= \nu_+ + \nu_- = \gamma_+(E_0)n_{1+} + \gamma_+(0)n'_+ + \\ &+ \gamma_-(0)n_{1-} + \gamma_-(E_0)n_-^0, \\ \lambda &= \gamma_+(E_0)n_{1+}\varphi_+ + \gamma_-(E_0)n_-^0\varphi; \\ \omega_-(E_0) &= \gamma_-(E_0)N^0, \quad \omega_+(0) = \gamma_+(0)N_-^0, \\ \varphi_\pm &= 2 \frac{d\hbar\sigma_\pm}{d\hbar(E_0^2)}; \\ \operatorname{div} \vec{j}'_\pm &= \left[\pm \frac{i\sigma_+^0 \delta_+}{e} + \frac{ic\sigma_{1\pm}}{e} (\vec{k}\vec{E}_0) \right] - \\ &- \frac{ic\sigma_{1\pm}}{e\omega} (\vec{E}_0 \vec{E}') + \frac{\sigma_\pm^0 E_1 k}{e} \left(\frac{n'_-}{n_-^0} - \frac{n'_+}{n_+^0} \right) \\ E_1 &= \frac{Tk}{e}; \quad \theta_\pm = 2 \frac{d\hbar\alpha_\pm}{d(E_0^2)}, \quad \delta_\pm = 1 \pm \varphi_\pm. \end{aligned} \quad (15)$$

Раскрывая векторные произведения, из (13) получим:

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{\omega_T}{\omega} + \frac{ic^2 k^2}{4\pi\sigma_0\omega} \right) \vec{E}' &= -\frac{c\Lambda' \vec{k} (\vec{\nabla}T \vec{E}')}{\omega} + \\ \frac{ic^2 \vec{k} (\vec{k} \vec{E}')}{4\pi\omega\sigma_0} + \frac{iE_1 \vec{k}}{k} \left(\frac{n'_-}{n_-^0} - \frac{n'_+}{n_+^0} \right) &+ \vec{\nabla}T \Lambda U \frac{\vec{E}_0 E'}{E_0^2} \\ U &= 2 \frac{d\hbar\Lambda}{d\hbar E_0^2}, \end{aligned} \quad (16)$$

где $\omega_T = -c\Lambda' \vec{k} \vec{\nabla}T$ частота термомагнитных волн [1].

Умножая (15) скалярно один раз на \vec{E}_0 , и второй раз на \vec{k} , легко получим:

$$\begin{aligned} \vec{E}_0 \vec{E}' &= iE_0 E_1 a \left(\frac{n'_-}{n_-^0} - \frac{n'_+}{n_+^0} \right); \\ \vec{k} \vec{E}' &= iE_1 k a \left(\frac{n'_-}{n_-^0} - \frac{n'_+}{n_+^0} \right) \\ a &= \frac{\Lambda' c k}{\omega_T \Lambda U \cos \alpha}, \quad (\vec{E}_0 \vec{k}) = E_0 k \cos \alpha. \end{aligned} \quad (17)$$

Нужно отметить, что $a \neq \infty$, и поэтому в а нельзя брать $\alpha = 90^\circ$. Мы в дальнейшем значок «о» у равновесных величин будем

опускать (n_{\pm}^0, N^0, E_0). Подставляя значения (15-17) в систему (6-9), получим

$$\left\{ \begin{array}{l} -i\omega - iku_+ a + \lambda_+(0) + \omega_+(E_0) \frac{n_{1+}}{n_0} \varphi_+ \times \\ \times \frac{iaE_1}{E} - \frac{\nu_+}{\nu_- i\omega} [i\lambda_+ + \omega_+(0)] \end{array} \right\} n'_+ + \left\{ \begin{array}{l} iku_+ a \frac{n_+}{n_-} + \frac{n_+}{n_-} ku_{1+} - \omega_+(E_0) \frac{n_{1+}}{n_0} \varphi_+ \times \\ \times \frac{iaE_1}{E} + \frac{\nu_+}{\nu_- i\omega} [i\lambda_- + \omega_-(E_0)] \end{array} \right\} n'_- = 0, \quad (18)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} i \frac{n_-}{n_+} ku_- a - \frac{n_+}{n_-} ku_{1-} - \omega_-(E_0) \frac{n_-}{n_+} \varphi_- \times \\ \times \frac{iaE'}{E} + \frac{\nu_-}{\nu_- i\omega} [i\lambda_+ + \omega_+(0)] \end{array} \right\} n'_+ + \left\{ \begin{array}{l} -i\omega - iu_- ka + \lambda_-(E) + \omega_-(E_0) \varphi_- \times \\ \times \frac{iaE'}{E} - \frac{\nu_-}{\nu_- i\omega} [i\lambda_- + \omega_-(E_0)] \end{array} \right\} n'_- = 0, \quad (19)$$

Здесь

$$\lambda \frac{aE'}{E} \frac{N}{n_-} = \lambda_-; \quad \frac{N}{n_+} \frac{aE'}{E} = \lambda_+$$

$$\omega_+(0) - u_{1+} k = \lambda_+(0), \omega_-(E_0) + u_{1-} k = \lambda_-(E).$$

Уравнения (18) и (19) запишем в сле-

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_1 n'_+ + \lambda_2 n' = 0 \\ \lambda_3 n'_+ + \lambda_4 n'_- = 0 \end{array} \right. . \quad (20)$$

Подставляя значения $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ из (18-19) в (21), получим

$$\lambda_1 \lambda_4 - \lambda_2 \lambda_3 = 0. \quad (21)$$

Уравнение для определения частоты и инкремента «терморекомбинационной» волны имеет вид:

$$\omega^2 + i(A_- + A_+) \omega + B_+ B_- - A_+ A_- = 0, \quad (22)$$

$$A_- = -iku_- a + \lambda_-(E_0) + \omega_-(E_0) \varphi_- \frac{iaE'}{E},$$

$$A_+ = iku_+ a \frac{n_+}{n_-} + \frac{n_+}{n_-} ku_{1+} - \omega_+(E_0) \varphi_+ \frac{iaE'}{E}, \quad (23)$$

$$B_- = iku_- a \frac{n_-}{n_+} - \frac{n_-}{n_+} ku_{1-} - \omega_-(E_0) \frac{n_-}{n_+} \varphi_- \frac{iaE'}{E},$$

$$B_+ = iku_+ a \frac{n_+}{n_-} + \frac{n_+}{n_-} ku_{1+} - \omega_+(E_0) \frac{n_{1+}}{n_-} \varphi_+ \frac{iaE'}{E},$$

Решение (22) с учетом (23) слишком сложно. Поэтому мы будем решать уравнение (22) при определенных аналитических значениях внешнего электрического поля. Легко проверить, что при $A_- = A_+$

$$E = \frac{\omega_+(0) \varphi_- \left[1 - \frac{\mu_- k E'}{\omega_+(0)} - \frac{\omega_+(E)}{\omega_+(0)} \frac{n_{1+}}{n_+} \frac{\varphi_+}{\varphi_-} \right]}{k \mu_- \left(\delta_- + \frac{\omega_T}{ck} r_- + \frac{\omega_T}{ck} \frac{\mu_+}{\mu_-} r_+ \right)}, \quad (24)$$

$$r_- = \frac{\alpha_- \theta_- \vec{E}_0 \vec{\nabla} T}{E^2 n_- \mu_-}; r_+ = \frac{\alpha_+ \theta_+ \vec{E} \vec{\nabla} T}{E^2 n_+ \mu_+}; \frac{B_-}{B_+} = \left(\frac{\nu_-}{\nu_+} \right)^2. \quad (25)$$

С учетом (24-25) получим из (22)

$$\omega_{1,2} = -iA_- \pm iB_+ \frac{\nu_-}{\nu_+}. \quad (26)$$

Поставляя значения A_- и B_+ , мы получим для частоты и инкремента терморекомбинационных волн следующие выражения

$$\omega_1 = -ku_- a + \omega_-(E_0) \varphi_- \frac{aE'}{E} - \frac{\nu_-}{\nu_+} ku_+ a \frac{n_+}{n_-} + \frac{\nu_-}{\nu_+} \omega_-(E) \frac{n_+}{n_-} \varphi_+ \frac{aE'}{E} + i \left[\frac{\nu_-}{\nu_+} \frac{n_+}{n_-} ku_{1+} - \lambda(E) \right], \quad (27)$$

$$\omega_2 = -ku_- a + \omega_-(E_0) \varphi_- \frac{aE'}{E} + \frac{\nu_-}{\nu_+} ku_+ a \frac{n_+}{n_-} - \frac{\nu_-}{\nu_+} \omega_-(E) \frac{n_+}{n_-} \varphi_+ \frac{aE'}{E} - i \left[\frac{\nu_-}{\nu_+} \frac{n_+}{n_-} ku_{1+} + \lambda(E) \right]. \quad (28)$$

АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Из выражения (26-27) видно, что волна с частотой ω_2 (28) затухающая и при частоте ω_2 не происходит излучения энергии из вышеуказанного полупроводника.

Излучения из вышеуказанного полупроводника происходит, если инкремент волны

$$\omega_1 = \frac{\nu_-}{\nu_+} \frac{n_+}{n_-} ku_{1+} - \lambda_-(E) \quad (29)$$

является положительной величиной, а это требует высокой концентрации дырок и

низкой концентрации электронов. Из (27) $\omega = \omega_0 + i\omega_1$ видно, что $a \sim \frac{1}{\omega_T}$ термомагнитные волны уменьшают частоту терморекомбинационных волн, а частота захвата электронов и частота испускания дырок увеличивает ее. Вероятно, что существуют значения $\omega_{\pm}(E_0)$ и ω_T , при которых в полупроводниках, имеющих вышеуказанную модель, энергию может излучаться более или менее стабильно.

Такая ситуация может происходить при определенных значениях внешнего электрического поля и постоянного градиента температуры.

1. Л.Э.Гуревич. *Термомагнитные волны и возбуждение магнитного поля в неравновесной плазме*, ЖЭТФ, **44** (1963) 548-555.
2. Л.Э.Гуревич, Б.Л. Гельмонт. *Гидротермо-магнитные волны в слабонеоднородной плазме*, ЖЭТФ, **46** (1964) 884-901.
3. Л.Э.Гуревич, В.И.Владимиров. *Кинетические свойства разряженной плазмы с большим лучистым давлением и эффекты взаимного увлечения электронов и фотонов*, ЖЭТФ, **44** (1963) 166-176.
4. E.R.Hasanov, M.F.Novruzov, A.Z.Panahov, A.I.Demirel. *Energy generation and amplitude of thermo magnetic waves in the conducting*

Наличие внешнего постоянного и переменного магнитного поля может изменить условия возникновения терморекомбинационных волн. При излучении энергии из среды сопротивление среды уменьшается и происходит колебание тока во внешней цепи. Для исследования внешней неустойчивости (т.е. когда вещественная часть импеданса отрицательна $\operatorname{Re} z < 0$) нужно вычислить импеданс полупроводника.

Эта задача требует учета граничных условий на концах среды электрического поля и, конечно, учета инжекции на концах среды.

medium/ Modern Physics Letters B. **22** (2008) 455-457.

5. E.R.Hasanov, M.F.Novruzov, A.Z.Panahov, A.I.Demirel. *Instability of thermo magnetic waves in the GeAu Semiconductors with impurities* international Journal of Pure and Applied Physics, **4** (2008) 23-28.
6. М.И.Иглицын, Э.Г.Пель, Л.Я.Первова, В.И.Фистуль. *Неустойчивость электронно-дырочной плазмы полупроводника, обусловленная нелинейностью вольтамперных характеристик*, ФТТ, **8** (1966) 3606.
7. Л.Э.Гуревич, Э.Р.Гасанов. *Теория спонтанных колебаний тока в кристаллах с глубокими ловушками*. *Физика твердого тела*, **11** (1962) 1433.

İKİTİP KEÇİRİCİLİKLİ AŞQARLI YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ DAYANIQSIZ TERMOREKOMBİNASIYA DALĞALARI

E.R. HƏSƏNOV, R.K.MUSTAFAYEVA, A.V.İSLAMZADƏ

Birqat və ikiqat mənfi aşqarlara malik yarımkəçiricilərdə sabit elektrik sahəsi və sabit temperatur qradienti olanda dayaniqsız termorekonbinasiya dalğalarının yayılması nəzəri olaraq isbat olunmuşdur. Termorekonbinasiya dalğalarının tezlik və inkrement nəzəri olaraq hesablanmışdır. Bu dalğaların dayaniqsızlıq şərtinə uyğun elektrik sahəsinin analitik ifadəsi hesablanmışdır.

UNSTABLE THERMORECOMBINATION WAVES IN IMPURITY SEMICONDUCTORS WITH TWO TYPES OF CURRENT OF CARRIES

E.R.HASANOV, R.K.MUSTAFAEV, A.V.ISLAMZADE

It has been theoretically shown that a non-stable thermorecombination wave propagates in semiconductors with the singly and doubly negatively charged impurity centers in the presence of constant electric field and constant temperature gradient. The frequency and increment of the thermorecombination wave have been calculated. An analytic formula for the constant external electric field at which the wave instability begins has been found.

Редактор: д. н. по физике Ш.Нагиев

УДК 621.315.592

ИЗОПЕРИОДИЧЕСКАЯ ГЕТЕРОСТРУКТУРА $Pb_{1-x}Sn_xSe/PbSe_{1-x}S_x/BaF_2$

И.Р.НУРИЕВ, Н.В.ФАРАДЖЕВ, С.С.ФАРЗАЛИЕВ

Институт Физики НАН Азербайджана

Баку, AZ1143, пр. Г.Джавида, 131

nazimfarajov@gmail.com

Поступила: 16.06.2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

Разработаны условия выращивания эпитаксиальных пленок $p\text{-}Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0,05$)/ $n\text{-}PbSe_{1-x}S_x$ ($x=0,07$) методом конденсации молекулярных пучков в вакууме 10^{-4} Па. В едином технологическом цикле на подложках BaF_2 (111) получены изопериодические эпитаксиальные фоточувствительные гетеропереходы $p\text{-}Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0,05$)/ $n\text{-}PbSe_{1-x}S_x$ ($x=0,07$), максимальное значение фоточувствительности которых наблюдается при длине волны $\lambda=6\text{мкм}$. Сравнением спектральной фоточувствительности гетеропереходов для различных составов, контактирующих пар, показано, что с увеличением значения x и соответственно уменьшением шириной запрещенной зоны, происходит перемещение максимума фоточувствительности в сторону длинных волн.

Ключевые слова: эпитаксия, гетеропереход, фоточувствительность, структура, цикл.

При изготовлении различных приборов инфракрасной техники (ИК) на область спектра $3\div 5$ и $8\div 12\text{мкм}$ находят широкое применение полупроводниковые соединения типа $A^{IV}B^{VI}$ и твердые растворы на их основе [1]. Для получения структурно совершенных, однородных эпитаксиальных пленок этих материалов с заданными толщиной, составом и концентрацией носителей заряда разработаны ряд методов [2]. Для того чтобы свойства гетеропереходов (ГП) были воспроизводимыми и предсказуемыми на основании сведений о свойствах контактирующих материалов, формирующих переход, необходимо выполнение целого ряда условий совместимости по механическим, кристаллохимическим, термическим свойствам, кристаллической и энергетической структуре. В первую очередь необходимо учитывать следующие параметры контактирующих материалов: а) постоянные решетки, б) ширина запрещенной зоны, в) коэффициент термического расширения, г) энергия электронного сродства, д) диэлектрическая проницаемость. Главным среди перечислен-

ных требований, как правило, является близость постоянных решеток материалов, образующих гетеропереходы. Несоответствие параметров решеток приводит к возникновению дефектов на границе раздела гетероперехода [3]. Желательно, чтобы в гетероструктурах, параметры кристаллических решеток контактирующих пар имели одинаковое значение. В таких структурах отсутствуют дислокации несоответствия, и полученные структуры имеют высокое кристаллическое совершенство с необходимыми электрофизическими и фотоэлектрическими параметрами.

Известно, что при несогласованных параметрах кристаллических решеток действие механических напряжений вызывает локальные вариации ширины запрещенной зоны, что может привести к существенным изменениям электрических свойств.

В связи с вышеизложенным, в настоящей работе рассматривается получение и исследование изопериодических эпитаксиальных гетероструктур $p\text{-}Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0,05$)/ $n\text{-}PbSe_{1-x}S_x$ ($x=0,07$) на подложках BaF_2 (111). Использован-

ные в качестве подложки монокристаллы BaF_2 имеют хорошую механическую прочность, химически инертны и прозрачны в ИК диапазоне спектра 3÷12 мкм [4]. Кнудсеновская ячейка, изготовленная из графита, была использована в качестве испарителя. Эпитаксиальные пленки выращивались методом конденсации молекулярных пучков (КМП), на основе которых получались гетеропереходы в вакууме 10^{-4} Па, с применением дополнительного источника паров селена (Se) во время роста. В качестве источника были использованы заранее синтезированные твердые растворы $Pb_{0,95}Sn_{0,05}Se$ и $PbSe_{0,93}S_{0,07}$ состав которых был определен рентгенодифракционным методом. Надо отметить что, согласование параметров решеток твердых растворов $Pb_{1-x}Sn_xSe$ и $PbSe_{1-x}S_x$ позволило создать изопериодическую структуру $Pb_{1-x}Sn_xSe/PbSe_{1-x}S_x/BaF_2$.

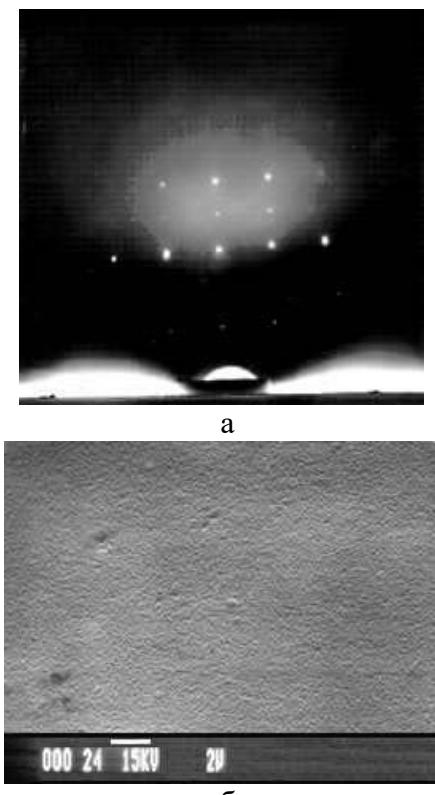


Рис.1

Электроннограмма (а) и электронномикроскопический снимок (б) поверхности пленок $Pb_{1-x}Sn_xSe$.

Методами электронографии, рентгеноdifрактометрии, электронномикроскопии оп-

ределялась структура, кристаллическое совершенство и морфология поверхности пленок.

Известно, что структура и морфология поверхности играет важную роль при изготовлении различных приборов [5, 6]. Установлено, что на подложках BaF_2 (111) при температуре ($T_p=620\div670$ К) растут структурно совершенные эпитаксиальные пленки $Pb_{1-x}Sn_xSe$ с кубической гранецентрированной решеткой ($a=6,10$ Å) с гладкой, чистой поверхностью, с плоскостью (111) (Рис.1.а, б)

С применением подвижной маски, с параллельно расположеннымми щелями в виде пересекающихся полос размером $0,3\times0,3$ мм², получались гетероструктуры для исследования электрофизических и фотоэлектрических свойств. Такая конструкция дала возможность получения матрицы, состоящей из нескольких элементов р-п гетероструктур в едином технологическом цикле, без нарушения вакуума.

Было установлено что, гетеропереходы p- $Pb_{1-x}Sn_xSe$ / n- $PbSe_{1-x}S_x$ полученные на основе пленок с концентрациями носителей заряда ($p=10^{16}\div10^{17}$; $n=10^{17}\div10^{18}$) см⁻³ обладают выпрямляющими свойствами (Рис.2).

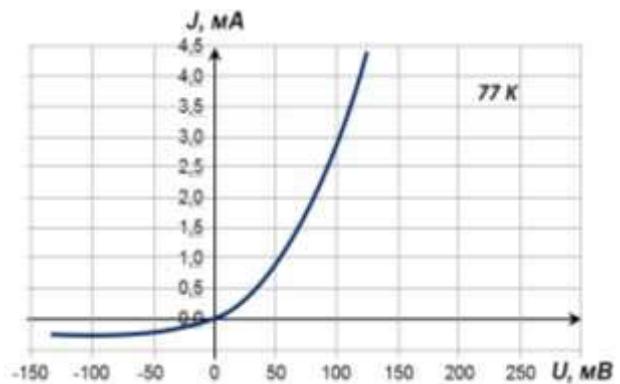


Рис.2
ВАХ ГП p- $Pb_{1-x}Sn_xSe$
($x=0,05$)/n- $PbSe_{1-x}S_x$ ($x=0,07$).

Вольт-амперные характеристики (ВАХ) полученных гетероструктур показывают, что утечки в них сильно зависят от степени структурного совершенства р-слоя. Прямая ветвь ВАХ ($U=30\div100$ мВ) подчиняется экс-

поненциальному закону $J=J_0e^{ph}(eU/\beta kT)$. При $\sim 77\text{K}$ коэффициент β изменяется в интервале $2\div 2,5$, что характерно для генерационно-рекомбинационного механизма протекания тока через область пространственного заряда. В области больших прямых смещений ($U=100\div 130\text{ мВ}$) прохождение тока определяется туннелированием ($\beta=9\div 10$). Таким образом, прямые токи моделируются механизмом рекомбинация-туннелирование на границе раздела. Большинство изготовленных p-n гетеропереходов оказались фоточувствительными при длине волн спектра $\lambda=6\text{мкм}$. Их спектральная характеристика представлена на Рис.3.



Рис.3

Спектральная характеристика ГП
p-Pb_{1-x}Sn_xSe/n-PbSe_{1-x}S_x.

Форма кривой соответствует типичной спектральной характеристике гетеропереходов. Как видно из рисунка, максимальное значение фоточувствительности наблюдается при длине волн $\lambda_{max}=6\text{мкм}$. Данная характеристика соответствует ГП изготовленному при температуре подложки равной 520К.

Дифференциальное сопротивление изготовленных элементов при нулевом смещении R_o составляет $1000\div 1500\text{Ом}$. Величина произведения R_oA составляло $1,2\div 1,3\text{Ом}\cdot\text{см}^2$ (A - площадь перехода) при температуре жидкого азота. R_o определяется из выражения $R_o=kT/qJ_o$, где J_o - ток при нулевом смещении. Величина R_oA сравнима с аналогич-

ными величинами для диодов Шоттки на основе Pb_{1-x}Sn_xSe, описанных в литературе.

В исследованных ГП сигнал фотоэ.д.с. (S) достигает наибольших значений при концентрации дырок в пленках Pb_{1-x}Sn_xSe $p=10^{16}\div 10^{17}\text{см}^{-3}$. При $p>4\cdot 10^{17}\text{см}^{-3}$, величина S быстро убывает с ростом концентрации и при $p=10^{17}\text{см}^{-3}$ фотоответ практически не регистрируется. При уменьшении концентрации от $p=10^{16}\text{см}^{-3}$ сигнал фотоответа также начинает падать, однако сравнительно медленнее. Для всех исследованных ГП концентрация электронов в пленках PbSe_{1-x}S_x составляла $n=10^{18}\text{см}^{-3}$.

Было проведено сравнение спектральной фоточувствительности изопериодических ГП для различных составов контактирующих пар p-Pb_{1-x}Sn_xSe $x=(0,01; 0,03; 0,05)$; n-PbSe_{1-x}S_x $x=(0,03; 0,05; 0,07)$. Оказалось, что с увеличением значения x наблюдается перемещение максимума фоточувствительности в сторону длинных волн, что связано с увеличением ширины запрещенной зоны (Рис.4.).

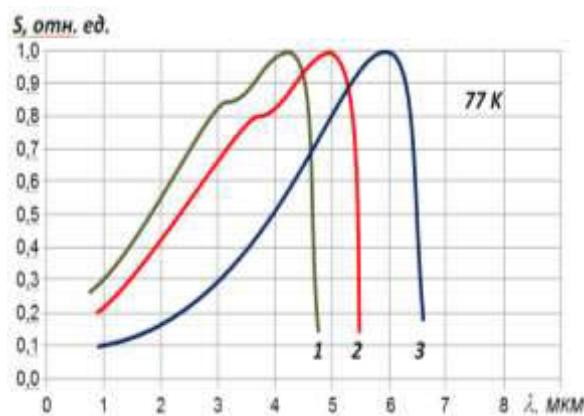


Рис.4

Спектральные характеристики ГП
p-Pb_{1-x}Sn_xSe/n-PbSe_{1-x}S_x при различных составах
контактирующих пар
1 – $x=0,01; 0,03$, 2 – $x=0,03; 0,05$,
3 – $x=0,05; 0,07$

Определены оптимальные условия выращивания эпитаксиальных пленок и получены фоточувствительные гетеропереходы Pb_{1-x}Sn_xSePbSe_{1-x}S_x на монокристаллических подложках BaF₂ (111). Показано, что с увеличением значения x в пленках, макси-

мальная фоточувствительность гетеропереходов смещается в сторону длинных волн, что объясняется увеличением ширины запрещенной зоны.

1. Ф.Ф.Сизов. Твердые растворы халькогенидов свинца и олова и фотоприемники на их основе, Зарубежная электронная техника, **24** (1977) 14-17.
2. А.В.Матвеенко и др. Термическое вакуумное напыление эпитаксиальных полупроводниковых соединений группы $A^{IV}B^{VI}$, Зарубежная электронная техника, **11** (1982) 54-58.
3. W.G.Oldham, A.G.Milnes. Interface states in

abrupt semiconductor heterojunctions, Solid State Electron, **7** (1964) 153-165.

4. Е.М.Воронкова, Гречушников В.Н. и др. Оптические материалы для инфракрасной техники, Москва, Наука, (1965) 335.
5. А.М.Афанасьев, П.А.Александров, Р.М.Имамов. Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев, Москва, Наука, (1989) 151.
6. И.Р.Нуриев. Морфология поверхности, фототехнические свойства эпитаксиальных пленок узкозонных халькогенидов $A^{IV}B^{VI}$, Москва, Прикладная физика, №5 (2013) 16-18.

Pb_{1-x}Sn_xSe / PbSe_{1-x}S_x / BaF₂ İZOPERİODİK HETEROKEÇİDLƏRİ

H.R.NURIYEV, N.V.FƏRƏRCOV, S.S.FƏRZƏLİYEV

Molekulyar dəstədən kondensasiya metodu ilə 10^{-4} Pa vakuumda p-P_{1-x}Sn_xSe ($x=0,05$)/n-PbSe_{1-x}S_x ($x=0,07$) epitaksial təbəqələrin yetişdirilməsi şərtləri işlənib hazırlanmışdır. Vahid texnoloji şəraitdə, fotohəssaslığın maksimumu $\lambda=6\text{mkm}$ dalğa uzunluğunda olan, BaF₂ (111) allıqları üzərində izoperiodik epitaksial, fotohəssas p-P_{1-x}Sn_xSe ($x=0,05$)/n-PbSe_{1-x}S_x ($x=0,07$) heterokeçidləri alınmışdır. Müxtəlif tərkiblərdə alınmış heterokeçidlərin fotohəssaslığının spektral xarakteristikalarının müqayisəsi göstərmişdir ki, x kəmiyyətinin artması və uyğun olaraq qadağan olunmuş zolağın eninin azalması ilə fotohəssaslığın maksimumu uzun dalgalara tərəf sürüşməsi baş verir.

ISOPERIODIC HETEROJUNCTION Pb_{1-x}Sn_xSe / PbSe_{1-x}S_x / BaF₂

H.R.NURIYEV, N.V.FARAJOV, S.S.FARZALIYEV

Growth conditions of p-P_{1-x}Sn_xSe ($x=0,05$)/n-PbSe_{1-x}S_x ($x=0,07$) epitaxial films in 10^{-4} Pa vacuum by the molecular beam condensation method have been established. In a uniform technological cycle on the BaF₂ (111) substrates have been received p-P_{1-x}Sn_xSe ($x=0,05$)/n-PbSe_{1-x}S_x ($x=0,07$) isoperiodic epitaxial photosensitive heterojunctions, which maximum value of photosensitivity has observed in the $\lambda=4-6\text{mkm}$ range of wavelength. Comparison of spectral photosensitivity for various compositions of the contacting couples has showed that happened movement of maximum of photosensitivity towards long waves as a result of increase in value x and respectively reduction of width of the forbidden zone.

Редактор: проф. С.Мехтиева

ВЯЗКОСТЬ ПРИ ТЕЧЕНИИ НЕНЬЮТОНОВСКОЙ ЖИДКОСТИ ПО КРУГЛЫМ ЦИЛИНДРИЧЕСКИМ ТРУБАМ

Г.Т.ГАСАНОВ, А.Н.ДЖАФАРОВА, М.А.ДЖАФАРОВА

Азербайджанская Государственная Нефтяная Академия
AZ 1010, Баку, пр. Азадлыг, 20
aymin@mail.ru

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

Теоретически выведена формула, которая позволяет определить вязкость вязкопластичной жидкости с переменной вязкостью в нестационарном режиме. Установлено, что вязкость при малых значениях времени существенно изменяется со временем, а при больших значениях она стремится к своему стационарному значению.

Ключевые слова: вязкость, жидкость, скорость, нестационарный режим.

ВВЕДЕНИЕ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Вязкость является одной из важных теплофизических характеристик жидкостей и по этой причине ее исследованию посвящено огромное количество работ, анализ которых приводится в [1-5]. В основу всех существующих методов исследования коэффициента вязкости лежит закон внутреннего трения Ньютона и гидродинамическая теория ламинарного стационарного движения вязких жидкостей. Наибольшее практическое применение, в частности в нефтяной и химической промышленности, нашел капиллярный вискозиметр, основанный на ламинарном стационарном движении вязких жидкостей в капиллярной трубке.

Многокомпонентные жидкости как гомогенные, так и гетерогенные, в большей степени, могут содержать в своем составе компоненты, значительно изменяющие вязкость жидкости, и даже кардинально меняющие саму физическую основу и природу внутреннего трения. Многочисленные эксперименты проведенные с многокомпонентными жидкостями показали, что в таких жидкостях гипотеза вязкостного трения Ньютона (пропорциональность напряжений градиенту скорости относительного движения жидкости) неприемлема [6,7]. Соответственно, такие жидкости принято

называть неньютоновскими жидкостями. Среди неньютоновских жидкостей принято выделять вязкопластичные, вязкоупругие, псевдоупругие и дилатантные жидкости.

Обобщая имеющиеся литературные материалы можно прийти к заключению, что для решения практических задач в неньютоновских жидкостях наиболее распространенными самыми простыми с математической точки зрения являются модели Шведова-Бинггама, степенной закон Оствальда де Ваале и Гершеля - Балкли.

В данной работе мы рассматриваем вязкость вязких вязкопластичных, вязкоупругих жидкостей. Для вязкопластичных жидкостей характерной особенностью является то, что они до достижения некоторого внутреннего напряжения ведут себя как твердые тела и лишь при превышении внутреннего напряжения выше критической величины начинают двигаться как обычные жидкости. Причиной такого явления является то, что вязкопластичные жидкости имеют пространственную жесткую внутреннюю структуру, сопротивляющуюся любым внутренним напряжениям меньшим критической величины, это критическое напряжение в литературе называют статистическим напряжением сдвига. Для вязкопла-

стичных жидкостей справедлив закон Шведова-Бингама:

$$\tau = \tau_0 + \eta \frac{d\upsilon}{dr} \quad (1)$$

где τ - приложенное касательное напряжение, τ_0 - предельное статическое напряжение сдвига, η - коэффициент структурной вязкости, $\frac{d\upsilon}{dr}$ - градиент скорости.

К вязкопластичным жидкостям относятся коллоидные растворы, полимеры, различные нефти. Очевидно, что для вязкопластичной жидкости формула определения вязкости будет отличаться от формулы, полученной на основе формулы Пуазейля, выведенной для вязкой жидкости.

Как известно, ламинарное стационарное движение вязкой жидкости в капиллярной трубе описывается уравнением с постоянным коэффициентом

$$\eta \left(\frac{d^2\upsilon}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\upsilon}{dr} \right) + \frac{\Delta P}{l} = 0 \quad (2)$$

Количество жидкости, протекающее через поперечное сечение трубы за единицу времени, т.е. расход жидкости определяется по формуле

$$Q = \int_0^R 2\pi r \upsilon(r) dr = const \quad (3)$$

Из решения уравнения (2) при условиях $\upsilon(R) = 0$, $\upsilon(0) \neq \infty$ и воспользовавшись формулой (3) для определения коэффициента вязкости получена формула

$$\eta_\infty = \frac{\pi R^4 \Delta P}{8lQ_\infty}. \quad (4)$$

Отметим, что индекс "∞" соответствует стационарному движению.

Как известно, все реальные технологические процессы нестационарные и вследствие этого как перепад давления, так и расход жидкости, изменяются со временем. Очевидно изменения ΔP и Q со временем приведет и к изменению вязкости жидкости со временем. Естественно, тогда формула для определения коэффициента вязкости, выведенная для случая постоянного давления и расхода жидкости

будет отличаться от формулы для переменного давления и расхода жидкости. В связи с отмеченным возникает необходимость определения нестационарной вязкости жидкостей.

С этой целью рассмотрим ламинарное течение вязкой жидкости в цилиндрической трубе с переменным перепадом давления $\Delta P = P_1 - P$ на концах трубы и расхода жидкости. Данная задача сводится к решению уравнения для нестационарного режима, т.е.

$$\rho \frac{\partial \upsilon}{\partial t} = \eta(t) \left(\frac{\partial^2 \upsilon}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \upsilon}{\partial r} \right) + \frac{\Delta P(t)}{l}. \quad (5)$$

Для решения уравнения (5) задаются следующие начальное и граничные условия:

$$\upsilon(r, 0) = 0; \quad \upsilon(R, t) = 0; \quad \frac{\partial \upsilon}{\partial r}(0, t) = 0. \quad (6)$$

Применяя метод осреднения силы инерции по радиусу трубы [8], т. е.

$$\varphi(t) = \frac{1}{R} \int_0^R \rho \frac{\partial \upsilon}{\partial t}(r, t) dr, \quad (7)$$

к уравнению (5) получим:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r \frac{d\upsilon}{dr}) = (\varphi(t) - \frac{\Delta P}{l}) \frac{1}{\eta}. \quad (8)$$

Решение этого уравнения при отмеченных выше условиях (6) имеет вид

$$\upsilon = \left(\varphi - \frac{\Delta P}{l} \right) \left(\frac{r - R}{4\eta} \right). \quad (9)$$

При этом расход жидкости через поперечное сечение цилиндрической трубы будет определяться по формуле

$$Q(t) = -\frac{\pi R^4}{8\eta} \left(\varphi(t) - \frac{\Delta P}{l} \right). \quad (10)$$

Из решения уравнений (7), (9) и (10) для определения динамической вязкости вязких жидкостей выведена следующая расчетная формула:

$$\eta(t) = \frac{\pi R^4}{8Q} \cdot \frac{\Delta P}{l} - \frac{\rho R^2}{6} \frac{Q'}{Q}. \quad (11)$$

Таким образом формула (11) позволяет определять динамическую вязкость в нестационарном режиме при течении вязкой жидкости по круглой цилиндрической трубе. Очевидно при $\Delta P = \text{const}$, $Q = \text{const}$ формула (11) совпадает с формулой (4).

Аналогичным образом определяется динамическая вязкость вязкоупругих жидкостей, внутреннее трение которой отличается от закона внутреннего трения вязкой жидкости. Этот вопрос связан с тем, что растворы полимеров, смолистые нефти, глинистые растворы и некоторые другие жидкости обладают вязкоупругими свойствами. Для этой цели рассмотрено изотермическое нестационарное движение упруговязкой максвелловской жидкости в круглой цилиндрической трубе с переменными перепадом давления и расходом жидкости.

Решая обратную задачу для рассматриваемого случая, получено следующее уравнение для определения динамической вязкости при известных значениях плотности ρ и времени релаксации θ

$$\eta t_0 = (t_0 + \theta) \frac{\pi R^4 \Delta P^*(t_0)}{8\ell Q^*(t_0)} - \frac{\rho R^2 (t_0 + \theta)}{4t_0}, \quad (12)$$

где

$$\Delta P^*(t_0) = \int_0^{\infty} \Delta P(t) e^{-\frac{t}{t_0}} dt, \quad Q^*(t_0) = \int_0^{\infty} Q(t) e^{-\frac{t}{t_0}} dt.$$

В случаях, когда все физические параметры упруговязкой жидкости, такие как плотность ρ , время релаксации θ и вязкость η неизвестны, и требуется найти их сразу за один опыт, применяется метод детерминированных моментов. Для этой цели вводится момент k -го порядка для функций $Q(t) - Q_{\infty}$ и $\Delta P(t) - \Delta P_{\infty}$, т. е.

$$Q_k = \int_0^{\infty} [Q(t) - Q_{\infty}] \frac{t^k}{k!} dt;$$

$$\Delta P_k = \int_0^{\infty} [\Delta P(t) - \Delta P_{\infty}] \frac{t^k}{k!} dt \quad (13)$$

$$Q_{\infty} = \lim_{t \rightarrow \infty} Q(t); \quad \Delta P_{\infty} = \lim_{t \rightarrow \infty} \Delta P(t).$$

При этом для определения искомых величин получены формулы:

$$\eta = \frac{\pi R^4 \Delta P_0}{8\ell Q_0}$$

$$\rho = \eta \frac{4Q_1}{R^2 Q_0} - \frac{\pi R^2 \Delta P_1}{2\ell Q_0} + \frac{\pi R^2 \theta \Delta P_0}{2\ell Q_0} \quad (14)$$

$$\theta = \frac{\frac{R^2 \Delta P_2}{8\ell \eta} - \frac{Q_2}{\pi R^2} - \frac{R^2}{8\eta} \cdot \frac{\Delta P_1 \cdot Q_1}{\ell Q_0} + \frac{1}{\pi R^2} \cdot \frac{Q_1^2}{Q_0}}{\frac{Q_0}{4\pi \eta} - \frac{R^2}{8\eta} \cdot \frac{\Delta P_0 Q_1}{\ell Q_0} + \frac{R^2 \Delta P_1}{8\ell \eta}}$$

В случаях, когда перепад давления и расход жидкости со временем изменяются по законам

$$Q(t) = Q_0 (1 - e^{-k_1 t}),$$

$$\Delta P(t) = \Delta P_0 (1 - e^{-k_2 t})$$

для определения динамической вязкости имеем следующую формулу:

$$\eta = \frac{\pi R^4 \Delta P_{\infty}}{8\ell Q_{\infty}} \cdot \frac{k_1}{k_2} = \eta_0 \cdot \frac{k_1}{k_2}. \quad (15)$$

Вычисления, проведенные на основе экспериментальных данных, полученных непосредственно на бурящихся нефтяных скважинах при пуске насоса, показали, что $\frac{k_1}{k_2} = 0,87$.

Далее рассмотрим эту же задачу для течения вязкопластичных жидкостей по круглой цилиндрической трубе с постоянной вязкостью. Тогда данная задача, будет сводиться к решению уравнения (5) с учетом вязких и пластичных свойств жидкостей [7]:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = \eta \left(\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{\tau_0}{r} + \frac{\Delta P(t)}{l}. \quad (16)$$

Аналогично применяя к уравнению (16) метод осреднения и учитывая начальные и граничные условия (6) получим следующее уравнение:

$$\eta \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dv}{dr} \right) = \varphi - \frac{\Delta P}{l} + \frac{\tau_0}{r}. \quad (17)$$

Для скорости течения вязкопластичной жидкости в цилиндрической трубе получим:

$$v = \left(\varphi - \frac{\Delta P}{l} \right) \left(\frac{r^2 - R^2}{4\eta} \right) + \frac{\tau_0}{\eta} (r - R). \quad (18)$$

Расход жидкости через поперечное сечение трубы для вязкопластичных жидкостей определяется по формуле:

$$Q = -\frac{\pi R^4}{8\eta} \left(\varphi - \frac{\Delta P}{l} \right) - \frac{\pi \tau_0 R^3}{3\eta}. \quad (19)$$

Аналогично вышеизложенному и с учетом (18) и (19) для вязкости вязкопластичных жидкостей выведена расчетная формула

$$\eta = \frac{\pi R^4}{8Q} \frac{\Delta P}{l} - \frac{\rho R^2}{6} \frac{Q'}{Q} - \frac{\pi R^3}{3} \frac{\tau_0}{Q}. \quad (20)$$

Из сравнения уравнения (11) и (20) видно, что вязкость для вязкопластичной жидкости отличается от вязкости вязкой жидкости на $-\frac{\pi R^3}{3} \frac{\tau_0}{Q}$.

При течении вязкопластичной жидкости по круглой цилиндрической трубе с переменным перепадом давления на концах трубы и расхода жидкости вязкость будет изменяться со временем.

Определение вязкости вязкопластичной жидкости с переменной вязкостью в нестационарном режиме математически сводится к решению уравнения движения вязкопластичной жидкости по цилиндрической трубе.

Дифференциальное уравнение движения вязкопластичной жидкости в круглой цилиндрической трубе при ламинарном режиме течения имеет вид:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = \eta(t) \left(\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{\tau_0}{r} + \frac{\Delta P(t)}{l}. \quad (21)$$

При больших напряжениях сдвига принимается, что уравнение (21) описывает всю

область течения. Начальное и граничные условия задаются в виде (6).

Аналогично выше указанному методу определяем скорость течения вязкопластичной жидкости, которая равна:

$$v = \left(\frac{\varphi(t)}{v} - \frac{\Delta P}{\rho v} \right) \left(\frac{r^2 - R^2}{4} \right) + \frac{\tau_0}{\rho v} (r - R). \quad (22)$$

Расход жидкости определяется по формуле:

$$Q(t) = \int_0^R 2\pi r v(r, t) dr. \quad (23)$$

Решая задачу (21) с использованием (6), (22) и (23) по аналогичному методу [8] для определения кинематической вязкости вязкопластичной жидкости выведена расчетная формула:

$$0,4 \frac{\tau_0}{\rho R} \frac{v'}{v} = -\frac{48 Q v^2}{\pi R^6} - \left(\frac{8 Q'}{\pi R^4} - \frac{6 \Delta P}{\rho l R} + \frac{16 \tau_0}{\rho R^3} \right). \quad (24)$$

Используя экспериментальные данные [7] и проводя вычисления в среде программ Mathcad по выведенной формуле (24), произведена визуализация результатов на Рис. 1.

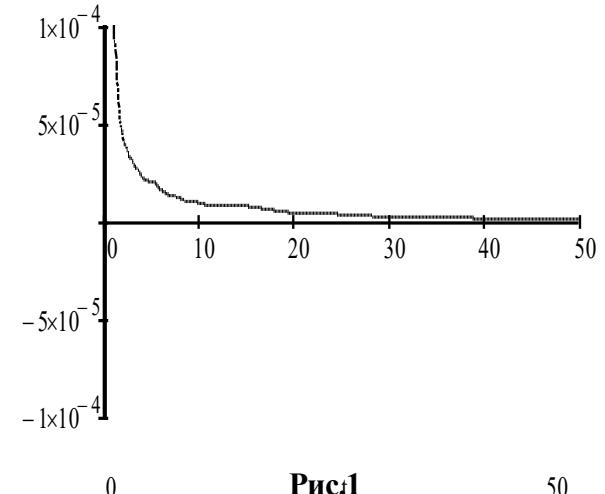


Рис.1
График зависимости кинематической вязкости v ($\text{м}^2/\text{с}$) от времени t (с).

Из рисунка видно, что вязкость при малых значениях времени существенно изменяется со временем, а при больших значениях

времени она стремится к своему стационарному значению.

Эксперименты, проведенные с различными высокопарафинистыми и высоковязкими нефтями показали, что зависимость напряжения сдвига от скорости сдвига с достаточной точностью может быть выражена обобщением модели Шведова-Бингама в виде степенного закона, т.е. известной моделью Гершеля-Балкли.

$$\tau = \tau_0 + \eta \left(\frac{dv}{dr} \right)^n. \quad (25)$$

При стационарном движении этих жидкостей по круглым цилиндрическим трубам уравнение имеет вид:

$$\frac{\Delta P}{2l} \cdot r = \tau_0 - \eta \left(\frac{dv}{dr} \right)^n, \quad (26)$$

отсюда имеем:

$$\left(\frac{dv}{dr} \right)^n = \frac{\tau_0}{\eta} - \frac{\Delta P}{2l\eta} \cdot r. \quad (27)$$

Учитывая, что

$$v = \int_0^R \left(\frac{\tau_0}{\eta} - \frac{\Delta P r}{2l\eta} \right)^{\frac{1}{n}} dr, \quad (28)$$

для скорости течения неньютоновской жидкости по круглым цилиндрическим трубам имеем:

$$v = -\frac{2l\eta}{\Delta P} \frac{n}{n+1} \left(\left(\frac{\tau_0}{\eta} - \frac{\Delta P R}{2l\eta} \right)^{\frac{n+1}{n}} - \left(\frac{\tau_0}{\eta} \right)^{\frac{n+1}{n}} \right). \quad (29)$$

Аналогично исходя из (23), определяем расход жидкости, который равен

$$Q = -\frac{2\pi R^2 l}{\Delta P} \cdot \frac{n}{n+1} \cdot \frac{1}{\eta^{\frac{1}{n}}} \left(\left(\tau_0 - \frac{\Delta P R}{2l} \right)^{\frac{n+1}{n}} - \left(\tau_0 \right)^{\frac{n+1}{n}} \right) \quad (30)$$

Отсюда для вязкости неньютоновской жидкости имеем следующее уравнение:

$$\eta = \frac{2\pi R^2 l}{Q \Delta P} \frac{n}{n+1} \left(\left(\tau_0 - \frac{\Delta P R}{2l} \right)^{\frac{n+1}{n}} - \left(\tau_0 \right)^{\frac{n+1}{n}} \right)^n. \quad (31)$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для проектирования режима транспортировки нефтей крайне важен правильный выбор уравнений для описания течения этих нефтей. Необходимость в таких уравнениях значительно возросла в последние годы в связи с увеличением объема добычи высокопарафинистых и высоковязких нефтей в республике и транспортировании их в различных климатических условиях. Поэтому учитывая, что теплофизические параметры жидкости, в том числе и вязкость очень чувствительны к условиям их определения, разработанный нами метод не требует создания лабораторной экспериментальной установки для их исследования и позволяет их определение в ходе технологического процесса, основываясь на информации об изменении перепада давления и расхода жидкости со временем, полученной в реальных условиях. Определение теплофизических параметров позволяет управлять технологическим процессом. Точность определения вязкости по предложенному методу зависит от точности полученных информаций об изменении перепада давления и расхода жидкости со временем, то есть от точности применяемых для этой цели измерительных приборов.

1. Г.Т.Гасанов, Х.Г.Гасанов. *Нестационарный метод исследования теплофизических параметров жидкостей*, Баку, (2013) 216.
2. И.Н.Евдокимов, Н.Ю.Елисеев. *Молекулярные механизмы вязкости жидкости и газа*, Москва, (2005) 56.
3. Д.Н.Глумов, А.В.Стрекалов. *Способ расчета динамической вязкости газов в широком*

- диапазоне давлений, *Нефтегазовое дело*, №1 (2011) 194-209.
4. В.Г.Приданов, В.И.Хоничев. *К вопросу о течении неньютоновской жидкости. Журнал технической физики*, 82 (2012) 11-14.
 5. Е.Фукс. *Вязкость и пластичность нефте-продуктов*, М. Гостехиздат, (2003) 116.
 6. С.А.Положаенко. *Математическое моделирование процессов фильтрации аномальных* жидкостей, Труды Одесского Политехнического Университета, 27 (2007) 151-155 .
 7. П.М.Огibalov, А.Х.Мирзаджанзаде. *Нестационарные движения вязкопластичных сред*, Издательство МГУ, Москва, (1970) 416.
 8. Н.А.Следкин. *Динамика вязкой несжимаемой жидкости*, М. Физматгиз, (1952) 360.

QEYRİ-NYUTON MAYENİN DAİRƏVİ SİLİNDİRİK BORULARDA HƏRƏKƏTİ ZAMANI YARANAN

ÖZLÜLÜK

Q.T.HƏSƏNOV, A.N.CƏFƏROVA, M.Ə.CƏFƏROVA

Dəyişən özlülüyə malik özüplastik mayenin qeyri-stasionar rejimdə özlülüyünü təyin etməyə imkan verən nəzəri düstur çıxarılmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, zamanın kiçik qiymətlərində özlülük zamandan asılı olaraq əsaslı dəyişir, zamanın böyük qiymətlərində isə özlülük özünün stasionar qiymətinə yaxınlaşır.

THE VISCOSITY OF NON-NEWTONIAN FLUID IN THE FLOW OF A ROUND CYLINDRICAL TUBE

G.T.HASANOV, A.N.JAFAROVA, M.A.JAFAROVA

Theoretically a formula that allows determining the viscosity of viscoplastic fluid (non-Newtonian fluid) with variable viscosity in the non-steady state has been derived. It has been found that the viscosity at low values of time varies considerably over time, and for large values of the time it tends to its steady-state value.

Редактор: к.ф.-м.н. К.Нуриев

УДК 537. 226

ЭЛЕКТРЕТНЫЙ КОМПОЗИТ ПОЛИМЕР-СЕГНЕТОПЬЕЗОКЕРАМИКА И ВОЗМОЖНОСТИ ЕГО ИССЛЕДОВАНИЯ КАК ИСТОЧНИКА ЭНЕРГИИ

М.А.ГУРБАНОВ, З.А.ДАДАШЕВ, Ф.Н.ТАТАРДАР, И.С.РАМАЗАНОВА,
А.А.БАЙРАМОВ*, Э.Г.ГАШИМОВ*

*Институт Физики НАН Азербайджана,
AZ 1143, г Баку, пр. Г.Джавида, 131
Военная Академия Вооруженных Сил*,
AZ 1141, г Баку, пр. Мехтиева Шафаята 136
mirza.kurbanov@yahoo.com
azad.bayramov@yahoo.com*

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

В работе приводятся результаты исследования предварительной кристаллизации электретного элемента на основе фторсодержащих полимерных матриц и пьезоэлектрической фазы семейства цирконата-титаната-свинца (PZT). Установлено, что предварительная кристаллизация электретного элемента увеличивает величину электретной разности потенциалов и его стабильность. Это позволяет его считать перспективным материалом для использования в качестве высокоёмкого источника энергии, в том числе для мини летательных аппаратов.

Ключевые слова: электрет, композит, полимер, сегнетопьезокерамика.

ВВЕДЕНИЕ

Использование тактических особенностей местности повышает эффективность использования техники, включая военную, улучшает маневренность и скрытность, а также уменьшает уязвимость в боевых условиях. Тактические особенности местности обусловлены рельефом и другими географическими объектами. Оперативное получение координат о наземных объектах и целях чрезвычайно актуально для решения различных тактических задач. Этую информацию можно использовать в высокоточных боевых корреляционно-экстремально навигационных системах [1]. Информацию о топографических элементах местности получают различными способами, в том числе дистанционно с помощью мини летательных аппаратов (МЛА) [2,3]. Эффективность использования МЛА зависит в значи-

тельной степени от длительности автономного полета, что напрямую связано с емкостью и стабильностью электропитания МЛА. В данной статье приводятся результаты исследования электретного композита полимер-сегнетопьезокерамика с высокой диэлектрической проницаемостью с целью изготовления на его основе высоко ёмкого и стабильного источника электроэнергии для мини летательного аппарата

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Введение в неполярные полимеры, полиэтилен и полипропилен, пьезоэлектрических наполнителей позволяет получать на их основе электреты с высокой поверхностной плотностью и большой стабильностью заряда. Известно, что полярные термопластические полимеры по сравнению с полиолефинами обладают значительно выраженным электретны-

ми свойствами [4]. Поэтому, если предположить аддитивность вкладов компонентов, можно ожидать, что композиционные электреты на основе полярных полимеров будут обладать еще более высокой поверхностной плотностью и стабильностью заряда. Такими полярными полимерными диэлектриками, в частности, являются термопластические фторсодержащие полимеры, поливинилиденфторид (ПВДФ), полифторэтилен (Φ_3), сополимер винилиденфторида с тетрафторэтиленом (Φ_42), так как из-за полярности и электроотрицательного атома фтора они имеют глубокие ловушки и, следовательно, могут быть хорошими электретами в исходном состоянии[5,6].

Помимо указанных выше полярных материалов в работе исследовались неполярные полиэтилен высокой плотности (ПЭВП) и полипропилен (ПП). Поляризация материалов производилась при температуре $T = (333 \div 413)$ К, время поляризации 1 час и напряженности электрического поля E_n , равной (2 \div 8) МВ/м.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На Рис. 1 показана зависимость начальной поверхностной плотности заряда электретов Q на основе композиции ПВДФ+ЦТС-2, поляризованной при температуре

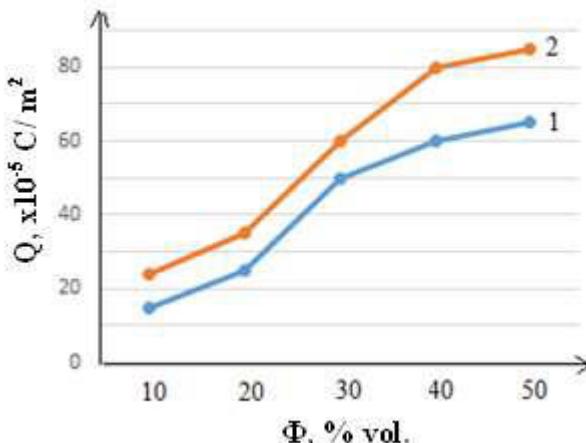


Рис.1

Зависимость плотности заряда электретов от объемного содержания ФЦТС-2 $Q=f(\Phi)$ для композита ПВДФ+ЦТС-2 при $T=413$ К:
1 – $E_n=6$ МВ/м; 2 – $E_n=8$ МВ/м.

$T_n=413$ К и различной напряженности электрического поля E_n , от содержания наполнителя Φ . В этом случае начальная поверхностная плотность электретного заряда практически непрерывно возрастает с увеличением содержания наполнителя в композиции. Однако, в отличии от композиции ПЭВП+ЦТС-2 или ПП+ЦТС-1 [5,6] электреты на основе композиций ПВДФ+ЦТС-2 нестабильны и заряд их быстро падает в течении нескольких часов (Рис.2).

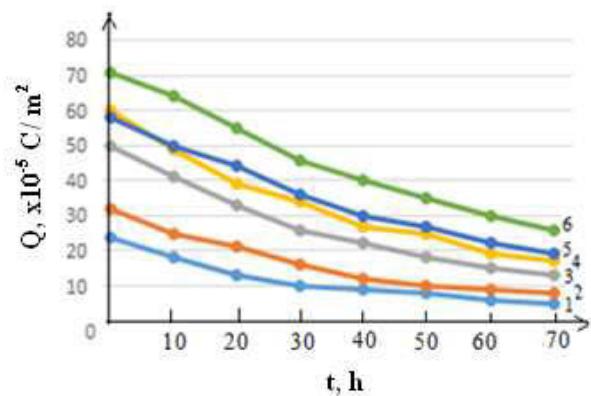


Рис.2

Зависимость плотности заряда электретов от времени t . $Q=f(t)$ для композита ПВДФ+ЦТС-2 при температуре $T=413$ К при различных концентрациях наполнителя Φ и напряженности электрического поля E_n : 1 – $\Phi=20\%$ об., $E_n=6$ МВ/м; 2 – $\Phi=30\%$ об., $E_n=6$ МВ/м; 3 – $\Phi=40\%$ об., $E_n=6$ МВ/м; 4 – $\Phi=20\%$ об., $E_n=8$ МВ/м; 5 – $\Phi=30\%$ об., $E_n=8$ МВ/м; 6 – $\Phi=40\%$ об., $E_n=8$ МВ/м.

В работе исследовались также электретные свойства композита на основе ПВДФ и сегнетоустойчивой пьезокерамики (ПКР-8) тетрагональной структуры. На Рис. 3 приведена зависимость электретной разности потенциала U электретов на основе композита ПВДФ+ПКР-8 от объемного содержания Φ наполнителя при оптимальных значениях E_n и T_n . При этом напряженность электрического поля поляризации варьировалась в пределе (2 \div 6) МВ/м, температура поляризации (333 \div 413) К и время поляризации 1 час.

Из рисунка видно, что U линейно растет с увеличением объемного содержания наполнителя ПКР-8 и имеет достаточно высокое

значение. Однако стабильность U этих композитов очень низкая.

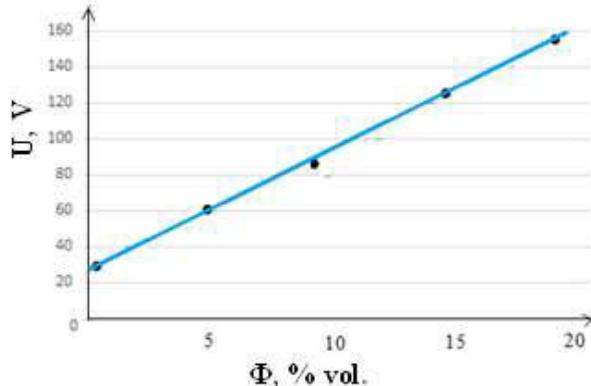


Рис.3

Зависимость $U=f(\Phi)$ для композита ПВДФ+ПКР-8 (PZT-8).

На Рис. 4 приведены зависимости U от t для исходного ПВДФ и композита с содержанием наполнителя 5%об., 10%об., 20%об., соответственно.

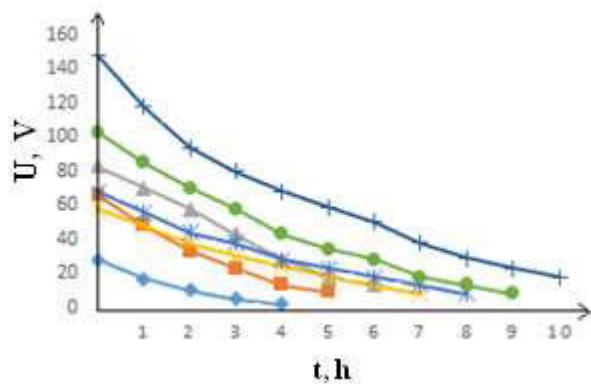


Рис.4

Зависимости $U=f(t)$ композитов ПВДФ+ПКР-8 (PZT-8) исходного ПВДФ. Кривая (♦) для исходного ПВДФ; кривые (x), (+) и (+) для композиций с содержанием наполнителя 5%об., 10%об., 20%об. ПКР-8 соответственно; кривая (●) для композита ПВДФ+ЦТС-1; кривая (▲) для композита ПВДФ+ЦТС-3; кривая (■) для композита ПВДФ+ЦТС-4.

Из рисунка видно, что при любом содержании наполнителя электреты нестабильны, и их электретные разности потенциалов в течении 10 часов практически падают до нуля. На этом же рисунке приведены зависимости U от t для композитов ПВДФ+ЦТС-1, ПВДФ+ЦТС-3 и ПВДФ+ЦТС-4, из которых

видно, что электреты на основе этих композитов также нестабильны и непригодны для использования их в качестве электретного материала. Были проведены также исследования электретных свойств композиций на основе фторсодержащих полимеров, обладающих еще большей полярностью, а именно сополимера винилиденфторида с тетрафторэтиленом и политрифторметилена.

На Рис.5а приведена зависимость электретной разности потенциала U от напряженности электрического поля поляризации E_p с различным содержанием наполнителя для оптимальной температуры поляризации $T=413\text{K}$.

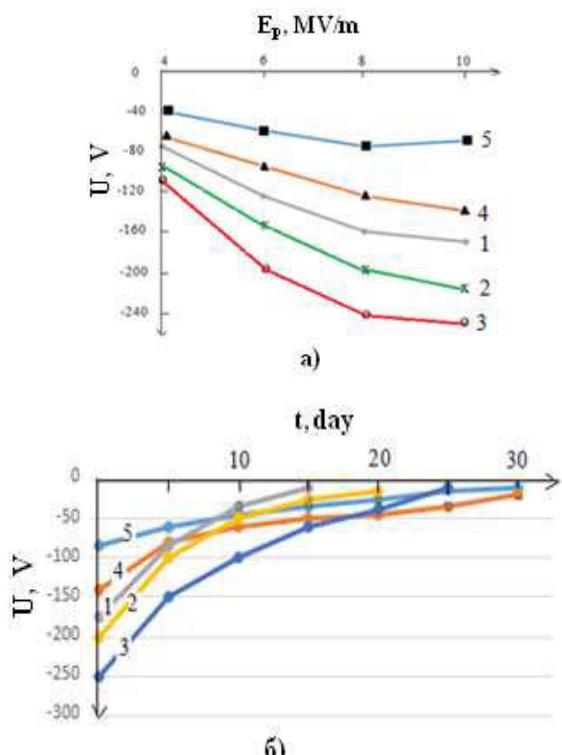


Рис.5

Зависимости $U=f(E_p)$ – (а), $U=f(t)$ – (б): Кривая 1 – исходный композит Ф-42; кривая 2 – композит Ф-42+50%об. ЦТС-2; Кривая 3 – композит Ф-42+10%об. ЦТС-2; кривая 4 – композит Ф-42+20%об. ЦТС-2; Кривая 5 – композит Ф-42+30% об. ЦТС-2.

Для всех композиций величина U в зависимости от E сначала растет и далее стремится к насыщению, причем электреты как из исходного Ф-42 (кривая 1), так и из композиций

Ф-42+ЦТС-2 (кривые 2, 3, 4, 5) имеют гомозаряды. Несмотря на высокую начальную поверхностную разность потенциалов, например для композиции Ф-42+10% об. ЦТС ($U = 250$ В), электреты из этих композиций для всех содержаний компонентов нестабильны (Рис. 5, б), так же, как и электреты из композиций на основе ПВДФ.

Еще большей начальной электретной разностью потенциалов обладают электреты из композиций на основе политрифтогорэтилена (Ф3) с ЦТС-2. На Рис. 6а представлена зависимость U от E при $T=393\text{K}$ для электретов из исходного Ф-3 (кривая 1) и композита Ф-3+5%об. ЦТС-2 (кривая 2). Электреты как из Ф-3, так и из композиций являлись гомозаряженными

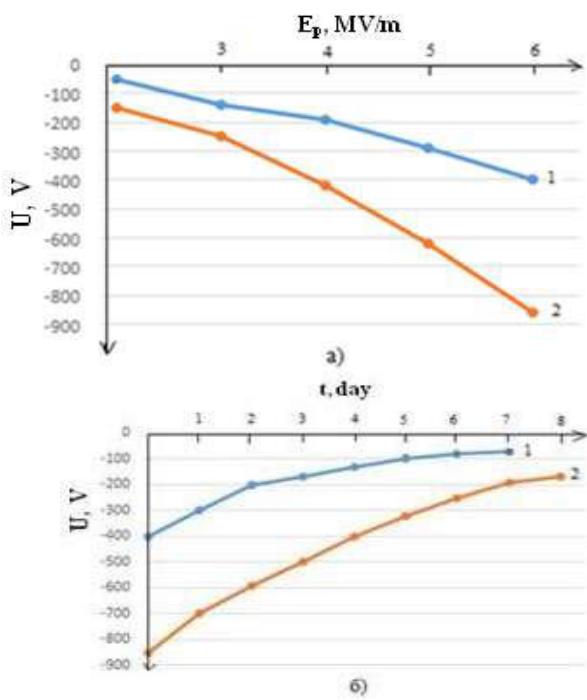


Рис.6

Зависимости $U=f(E)$ (а) и $U=f(t)$ (б) для композиции Ф-3+ЦТС-2:

кривая 1 для исходного полимера Ф-3;
кривая 2 для композита Ф-3+5%об. ЦТС-2.

Из Рис. 6а видно, что U_b зависимости от E растет быстрее, чем по линейному закону. Начальное значение U электретов из композиции очень высокое по сравнению с электретом

из исходного Ф-3. Однако, значение U со временем уменьшается и практически в течении 10 суток стремится к нулю (Рис. 6б). Таким образом, приведенные исследования показывают, что электреты из композиций, полученных на основе фторсодержащих термопластических полярных полимеров и сегнетопьезоэлектриков не обладают стабильностью.

Нестабильность электретов из композиций на основе фторсодержащих полимеров и сегнетопьезоэлектриков можно объяснить следующим образом. Из приведенной на Рис. 7 зависимости проводимости $\ln(\gamma)$ от обратной температуры для композиций ПВДФ+ЦТС-2 (кривые 1, 2) и ПЭВП+ЦТС-2 (кривые 3, 4) видно, что при одинаковом наполнении, например 10%об. ЦТС-2, композиция на основе ПВДФ+ЦТС-2 имеет заметно большую объемную проводимость по сравнению с композицией ПЭВП+ЦТС-2. Кроме того, характер изменения зависимости $\ln(\gamma)=f(1/T)$ этих композиций отличается, а именно, для композиции ПЭВП+ЦТС-2 при определенной температуре наблюдается позисторный эффект, а проводимость композиции ПВДФ+ЦТС-2 во всем температурном интервале уменьшается. Для увеличения электретной разности потенциалов указанных композитов нами были разработаны технологии получения электретных материалов с высокой стабильностью, электретной разностью потенциалов и диэлектрической проницаемостью.

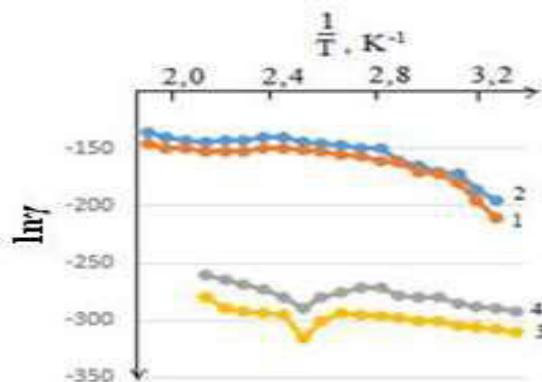


Рис.7

Зависимость $\ln(\gamma)=f(1/T)$: кривые 1 и 2 для композиций ПВДФ+ЦТС-2, кривые 3 и 4 для композиций ПЭВП+ЦТС-2; кривые 1 и 3 для $\Phi=10\text{об.об. ЦТС-2}$; кривые 2 и 4 для $\Phi=20\text{об.об. ЦТС-2}$.

Сущность этой технологии заключается в том, что электретный элемент с фторсодержащих полимерных матриц предварительно кристаллизуются в условиях плазмы электрического разряда. На Рис. 8 приведены изменения электретной разности потенциалов композита ПВДФ- $Pb(Ti_xZr_{1-x})O_3$ от параметра x состава $Pb(Ti_xZr_{1-x})O_3$; $x=0,2-0,8$. Объемное содержание пьезофазы равна $\Phi=5\%$ объема. Полученные результаты показывают, что электретная разность потенциалов в случае предварительной плазмокристаллизации электретных элементов при всех структурах пьезофазы заметно больше, чем у электретных элементов, некристаллизованных плазмой электрического разряда.

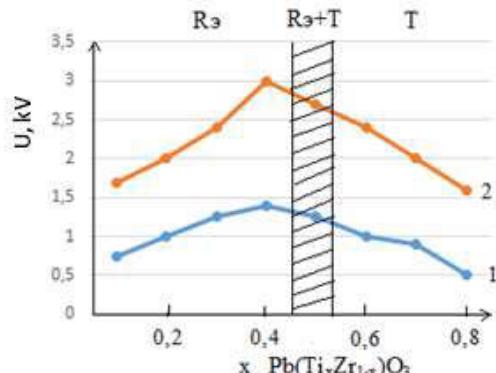


Рис.8

Изменение электретной разности потенциалов композита ПВДФ- $Pb(Ti_xZr_{1-x})O_3$ от концентрации компонента $PbTiO_3$. 1 – электротермополяризованные композиты; 2-предварительные плазмокристаллизованные, а затем электротермополяризованные.

R_Э-ромбодиэдральная структура; T-тетрагональная структура; R_Э+T – гетерогенная структура.

На Рис. 9. Приведена временная зависимость стабильности электретного заряда, определяемого, как отношение Q_t/Q_0 композитов Ф-42 – ПКР-3М и Ф-3 – ПКР-8: здесь Q_t – электретный заряд в момент времени t , Q_0 – электретный заряд в начальный момент времени. Напряженность электрического поля поляризации $E=1,5\text{MV/m}$; температура поляризации $T=373\text{K}$; время поляризации 0,5 часа, энергия разряда $W=45\text{Дж}$.

1. E.Q.Нәшімов. *Naviqasiya тәсәллөрінін һәллинің bir методу haqqında, Н.Әлиев adina ААНМ. Elmi əsərlər məstəası*, 20 (2013) 45-49.

Эти результаты показывают, что электретные элементы, которые предварительно кристаллизован в условиях действия плазмы электрического разряда, обладают высокой стабильностью. Повышенное значение электретной разности потенциалов и его высокая стабильность позволяет использовать их в качестве высокоэффективных и высоко ёмких источников энергии, в том числе для мини летательных аппаратов.

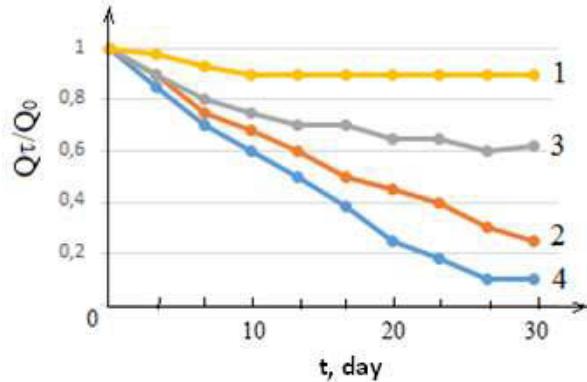


Рис.9

Временная зависимость стабильности электретного заряда: кривая 1 – для плазмокристаллизованного композита Ф-42 – ПКР-3М; кривая 2 – для термокристаллизованного композита Ф-42 – ПКР-3М; кривая 3 – для плазмокристаллизованного композита Ф-3 – ПКР-8; кривая 4 – термокристаллизованного композита Ф-3 – ПКР-8.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, проведенные исследования показывают, что предварительная кристаллизация электретного элемента на основе фторсодержащих полимерных матриц и пьезоэлектрической фазы семейства цирконата-титаната-свинца увеличивает величину электретной разности потенциалов и его стабильность. Это позволяет его считать перспективным материалом для использования в качестве высокоэффективного и высоко ёмкого источника энергии, в том числе для мини летательных аппаратов.

2. В.В.Бутин. *Дистанционно-пилотируемые летательные аппараты как источник данных* ДЗЗ, «Геоматика», 3 (2013) 24-27.

3. Е.А.Варварина. *Использование беспилотных летательных аппаратов для построения ортофотопланов линейных объектов*, Науки о Земле, 2 (2012) 66-70
4. М.К.Kerimov, M.A.Kurbanov, A.A.Bayramov, A.I.Mamedov. *Matrix Active Micro- and Nano-composites Based on the Polymer, Semiconductive and Ferropiezoceramic Materials. Nano-composites and Polymers with Analytical Methods, Book 3. Book edited by: John Cappoletti*, (2011) 375-404
5. M.A.Kurbanov, A.A.Bayramov, N.A.Safarov, I.S.Sultanaxmedova, S.N.Musaeva. *Electret composites polymer-piezoelectric with deep trapping centers on the interphase boundary. Patent US 8187488*, (2012)
6. M.A.Kurbanov, A.A.Bayramov, F.N.Tatardar, F.F.Yahyayev, A.A.Nuraliyev, Z.A.Dadashev, B.X.Xudayarov. *Ultra dispersestate of polymerphases as stabilizator of ultradispers estateinnanosized BaTiO₃, polar and nonpolar polymercomposites. Azerbaijan Journal of Physics, Fizika*, XX №1 (2014) 55-59.

ENERJİ MƏNBƏLƏRİ ÜÇÜN İSTİFADƏ OLUNA BİLƏN POLİMƏR-SEQNETOPYEZOKERAMİKA ƏSASINDA ELEKTRET KOMPOZİTİ

**M.Ə.QURBANOV, Z.A.DADAŞOV, F.N. TATARDAR, I.S. RAMAZANOVA, A.A.BAYRAMOV,
E.Q.HƏŞİMOV**

Məqalədə ftortərkibli polimer matrisali və PZT ailənin pyezoelektrik fazalı əsasında elektret elementlərin əvvəlcədən kristallaşdırmanın nəticələrini təhlil olunur. Müəyyən olunub ki, elektret elementin əvvəlcədən kristallaşdırması onun elektret potensial fərqini və stabilliyini artırır. Ona görə bu materialı yüksək effektlı və yüksək tutumlu enerji mənbə kimi, o cümlədən kiçik uçan aparatlarda istifadəsi üçün perspektiv hesab oluna bilər.

ELECTRET POLYMER-FERROPIEZOCERAMICS COMPOSITE FOR ENERGY SOURCE

**M.A.KURBANOV, Z.A.DADASHOV, F.N.TATARDAR, I.S.RAMAZANOVA, A.A.BAYRAMOV,
E.G.GASHIMOV**

The results of investigation of the preliminary crystallization of electret element based on the fluorine-containing polymer matrix and piezoelectric phase of lead zirconatetitanate (PZT) have been presented. It has been revealed that the preliminary crystallization of electret element has increased an electret potential difference and its stability. This has been allowed adopting it as perspective material for using as high effective and high capacity energy source also for mini aircraft.

Редактор: д.т.н. А.Мамедов

UOT: 536. 6

YARIMKEÇİRİCİ-METAL TİPLİ GaSb-CrSb EVTEKTİK KOMPOZİTİN TERMODİNAMİK XASSƏLƏRİ

R.N.RƏHİMÖV, İ.X.MƏMMƏDOV*, M.V.KAZİMOV D.H.ARASLI, A.Ə.XƏLİLOVA

*Azərbaycan MEA Fizika İnstitutu
AZ 1143, H.Cavid prospekti, 131.
Azərbaycan Milli Aviasiya Akademiyası**
*AZ 1045, Bakı, Binə, 25-km
rashad@physics.ab.az*

Daxil olub: 18.05.2015

Çapa verilib: 22.06.2015

Açar sözlər: DSC, xüsusi istilik tutumu, entropiya, entalpiya, Gibbs enerjisi.

REFERAT

Yarımkeçirici-metal tipli GaSb-CrSb evtektik kompozitdə istilik selinin dəyişməsi və xüsusi istilik tutumu $200\div900\text{K}$ temperatur bölməndə tədqiq edilib. 516K və 690K temperaturlarda ekzotermik piklər, 868K temperaturda endotermik pik müşahidə olunub. $T_1=300\text{K}\div502\text{K}$, $T_2=525\text{K}\div652\text{K}$, $T_3=705\text{K}\div785\text{K}$ temperatur bölmələrində istilik tutumun polinominal ifadələri alınaraq entropiya, entalpiya və Gibbs enerjisinin temperatur asılılıqları hesablanıb.

GİRİŞ

3d-keçid metalları və III-Y qrup birləşmələri əsasında yaranan maqnit xassələri evtektik kompozitlər müddətsiz ferromaqnit və ya antiferromaqnit material kimi sürətli yaddaş sistemlərin yaradılması üçün perspektiv material sayılır. Həm yarımkəcərıcı, həm də metal xassələr cəmləşən bu sinif evtektik kompozitlərdə metal qatmalar iynə şəklində matrisdə paralel düzülərək bərabər paylandığından, onlar özlərini qeyri-bircins yarımkəcərıcı kimi aparır. Belə kompozitlərin fiziki xassələri 3d-keçid metalların elektron konfiqurasiyasından, qatmaların həndəsi formasından və fazalar arası zonaların yaranışından asılı olur [1-4]. İlk işlərimizdə Fe, Mn elementləri, ikiqat GaSb və InSb birləşmələr əsasında alınmış evtektik kompozitlərin mikrostrukturu, morfolojiyası, elektron-fonon prosesləri öyrənilib.

GaSb-CrSb sisteminə daxil olan CrSb birləşməsində c oxuna perpendikulyar istiqamətdə düzülmüş ferromaqnit müstəvilər arasındaki əlaqə antiferromaqnit xarakter daşılığından [5, 6]. Belə sistemin az qatılıqlı maqnit material kimi öyrənilməsi əhəmiyyət kəsb edir. GaSb-CrSb evtektik kompozitin alınması ilk dəfə Müllerin işlərində göstərilib [1]. Umehara və b. GaSb-CrSb evtektik

kompozit hal diaqramını vermiş, Bricmen üsulu ilə müxtəlif sürətlərdə sintez olunmuş kompozitdə kristallaşma sürətinin metal qatmaların ölçülərinə və qatmalararası məsafələrə təsirini tədqiq edərək fazalararası enerjini hesablamaşdır [2]. [4]-cü işdə GaSb-CrSb kompozitin mikrostrukturu öyrənilərək metal qatmaların ölçüləri müəyyən olunub, rentgen-faza analizi ilə piklərin GaSb matrisinə və CrSb qatmalarına uyğun gəldiyi göstərilərək sistemin ikifazalılığı təsdiq edilib.

Məlumdur ki, xarici temperaturun dəyişməsi ilə atomlararası qarşılıqlı təsiri aşkar edən termik analiz materialın fiziki xassələrini tədqiq etmək üçün böyük əhəmiyyət kəsb edir. Termik analizin DSC və DTA üsulları geniş temperatur bölməndə materialda baş verən birinci və ikinci növ faza keçidləri, istilik prosesləri haqqında qıymətli məlumatlar almağa imkan verir. Son zamanlar yaradılan yeni cihazlar maddədə istilik selinin dəyişmə sürətini və diferensiallaşmış istilik selini ölçərək faza çevrilmələrinli, istilik tutumunu, ərimə-kristallaşma hadisəsini, oksidləşmə stabilliyini, müxtəlif proseslərin istilik kinetikasını dəqiq təyin etməyə imkan verir. Diferensial termik analizdə araşdırılan maddə və etalon nümunə eyni bir sobada yerləşir və xüsusi programla həyata keçirilən qızma və soyuma prosesində temperaturlar

fərqi yazılır. Paralel aparılan termoqrafiyik analizlə (TG) kütlənin dəyişməsi, parçalanma və ya korroziya qiymətləndirilir. Diferensial darama kalorimetrisində isə programla tənzimlənən temperatur dəyişdikcə nümunədə və etalonda istilik selinin sürətlərinin fərqi yazılır. DSC analizində istilik selinin dəyişməsi həm temperaturdan, həm də zamandan asılı olaraq yazılır və bu üsul istilik tutumunun və entalpiyanın hesablanması üçün istifadə olunur. Qazlardan fərqli olaraq kondensə olunmuş bərk cisimlərin termodinamik funksiyalarını nəzəri hesablamaq mümkün deyil. Ona görə də bu parametrlər əsasən istilik tutumunun və ya entalpiyanın dəyişməsinin kalorimetrisdə aparılmış təcrübə ölçüləri əsasında təyin olunur. Maddədə baş verən dəyişiklik yeni qərarlaşmış strukturun yaranması ilə baş verirsə belə çevrilməyə birinci növ faza keçidi kimi baxılır. Kristal quruluşun sıçrayışla dəyişdiyi birinci növ faza keçidindən fərqli olaraq ikinci növ faza keçidi strukturun temperaturla tədricən dəyişməsi ilə xarakterizə olunur. Belə çevrilmə zamanı entalpiya, entropiya və həcmi dəyişməsi müşahidə olunur.

[7]-ci işdə GaSb-CrSb evtektik kompozitin diferensial termik analizi aparılıraq, ərimənin başlangıç və son nöqtələri, ərimənin entalpiyası müəyyən edilib. İndiki işdə GaSb-CrSb evtektik kompozitin DSC əyrisi əsasında xüsusi istilik tutumu təyin olunub və onun temperatur asılılığından termodinamik parametrlər hesablanıb.

EKSPERİMENTİN APARILMASI

GaSb-CrSb kompozitin sintezi iki mərhələdə aparılıb. GaSb iki birləşməsi ayrı-ayrı elementlərin stexiometrik miqdardında birgə əridilib çoxsaylı zona ərintisindən keçirilib. Alınmış p-tipli GaSb monokristalında deşiklərin konsentrasiyası $p=1,2 \cdot 10^{17} \text{ sm}^{-3}$ olmuşdur. GaSb birləşməsi və 13,5çəki%-ində CrSb birlilikdə əridilmiş, 4 saat 1200K temperaturda vibrasiya olunmuş və şaquli Bricmen sobasında 0,3mm/dəqiqə sürətlə istiqamətli kristallaşma aparılıb.

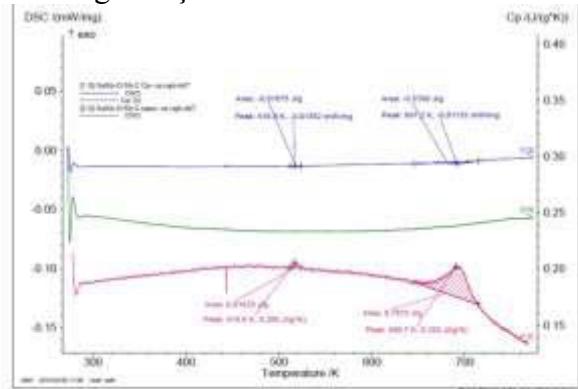
Diferensial darama kalorimetrik analizi "NETZSCH DSC 204F1" (Almaniya) cihazında argon atmosferində aparılıb. Çəkisi 40mg olan kompozit alüminium yuvacığa yerləşir. Etalon nümunə kimi sapfir, qızma sürəti 10 K/dəq, təsirsiz

qaz axınının sürəti 20 ml/dəq, seçilib. Tədqiqatlar 200-900K temperatur bölümündə aparılıbdır. İstilik selinin dəyişmə (DSC) əyrisindən və aşağıda verilmiş ifadədən istifadə olunaraq xüsusi istilik tutumu hesablanıb:

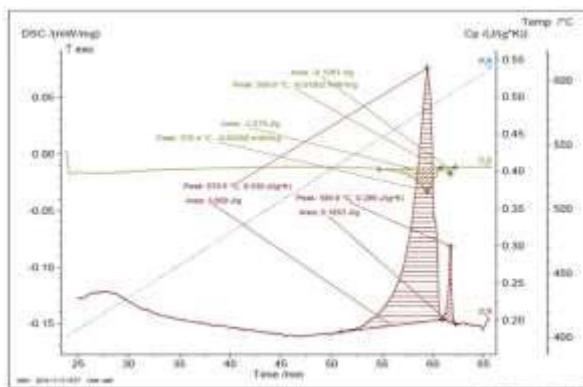
$$C_p = \frac{m_{\text{Standart}}}{m_{\text{Sample}}} \frac{DSC_{\text{Sample}} - DSC_{\text{Bas}}}{DSC_{\text{Standart}} - DSC_{\text{Bas}}} C_{p \text{ Standart}} \quad (1)$$

burada C_p , $C_{p \text{ standart}}$ - nümunənin və etalonun T temperaturundakı istilik tutumu; m_{standart} və m_{sample} -uyğun olaraq etalonun və nümunənin kütləsi; DSC_{standart} -standart əyridə DSC siqnalın T temperaturdakı qiyməti; DSC_{Bas} -baza xətində DSC siqnalın T temperaturdakı qiymətidir.

GaSb-CrSb kompoziti üçün 200-800K temperatur bölümündə "NETZSCH DSC 204F1" (Almaniya) cihazından alınmış DSC və C_p -nin temperatur asılılığı 1-ci şəkildə verilib.



a



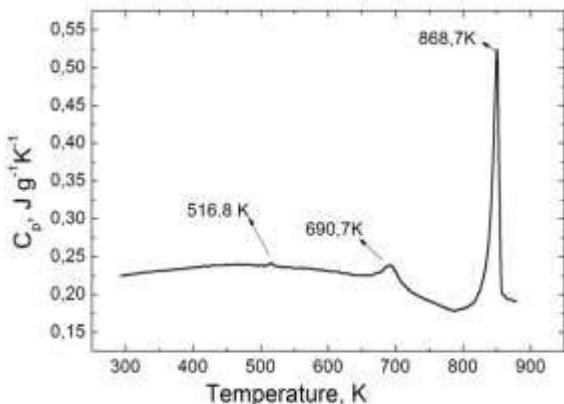
b

Şəkil 1

GaSb-CrSb kompoziti üçün a) 273-773K (0-500C), b) 673-873K (400-600C) temperatur bölümündə DSC və C_p asılılığı.

Cədvəl 1.

Pik, K	DSC area, J/g	C_p , J/gK	
516 (226°C)	-0,01875	0,206	ekzotermik
691 (401°C)	-0,05166	0,2031	ekzotermik
868 (578°C)	3,959	0,539	ekzotermik

**Şəkil 2**

GaSb-CrSb kompoziti üçün istilik tutumun temperatur asılılığı.

NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

1-ci şəkildən göründüyü kimi istilik selinin dəyişmə (DSC) əyrisində $T=516\text{K}$ və 690K temperaturlarda ekzotermik və 868K temperaturda endotermik effektlər baş verir (Cədvəl 1). 865K ətrafında baş verən endoeffekt maddədə gedən oksidləşmə ilə bağlı ola bilər. [7]-ci işdə $T=516\text{K}$ və 690K temperaturlarda baş verən ekzoeffektlərin maqnit çevrilmələri ilə baş verən II növ faza keçidinə uyğunluğu güman edilmişdi.

Məlündür ki, maddənin tarazlıq halında bir fazadan digərinə keçməsi ikinci növ faza keçidi sayılır. Belə keçidlərdə Gibbs enerjisi sıçrayışla dəyişir; gizli istiliyin udulması və ya ayrılması baş verir; həcm və ya istilik tutumu sıçrayışla dəyişir; elektrik müqavimətində, maqnitlənmə və seqneto-elektrik xassələrdə dəyişiklik yaranır. Belə keçidlərdə hansı fazanın dayanıqlı olması temperaturun və həcmiñ sabit qiymətində Qelmqolts sərbəst enerjisi $Q(V,T)$ ilə, verilmiş temperatur və təzyiqdə isə Gibbs potensialı $G(T,p)$ ilə müəyyən olunur. Həm enerji, həm də entropiya xarici təsirlərlə (təzyiq və temperatur) dəyişir, xarici şəraitlə müəyənləşən faza isə mümkün olan ən kiçik Gibbs potensialına malik olur.

Termodinamikadan məlumdur ki, istilik tutumu üçün 0K temperaturdan T temperaturadək alınmış bilgilərdən istifadə edərək maddənin bir sıra vacib xassələrini təsvir etmək olar [8].

$$\text{Entropiya} \quad S = \int_0^T \frac{C_p}{T} dT, \quad (2)$$

$$\text{Entalpiya} \quad H = \int_0^T C_p dT, \quad (3)$$

$$\text{Gibbs Enerjisi} \quad G = H - TS. \quad (4)$$

(2) - (4) tənliklərini həll etmək üçün $C_p(T)$ eksperimental əyrisinin polinominal ifadəsi alınmışdır. $C_p(T)$ asılılığı müxtəlif temperaturlarda mürəkkəb xarakter daşıduğundan ayrı-ayrı temperatur böülümlərində onun polinominal ifadəsi müxtəlif düsturlarla verilir:

$T_1=300\text{K}-502\text{K}$ temperatur bölümü üçün:

$$C_1(T_1) = 0.2998 - 0.0008 \cdot T_1 + \\ + 2.6144 \cdot 10^{-6} \cdot T_1^2 - 2.5107 \cdot 10^{-9} \cdot T_1^3$$

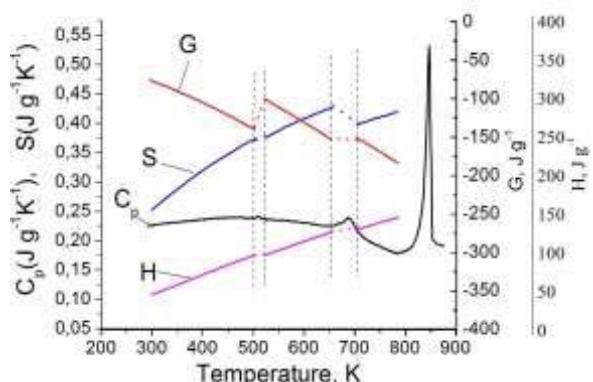
$T_2=525\text{K}-652\text{K}$, temperatur bölümü üçün:

$$C_2(T_2) = 0.297 - 0.00082 \cdot T_2 + \\ + 2.614 \cdot 10^{-6} \cdot T_2^2 - 2.4 \cdot 10^{-9} \cdot T_2^3$$

$T_3=705\text{K}-785\text{K}$ temperatur bölümü üçün:

$$C_3(T_3) = 0.115 + 0.00049 \cdot \\ T_3 - 5.0676 \cdot 10^{-7} \cdot T_3^2$$

Ekzotermik və endotermik effeklər baş verən temperatur böülümlərində $C_p(T)$ asılılığı mürəkkəb xarakter daşıduğundan bu böülümlərdə hesablama aparmaq mümkün olmamışdır. 3-cü Şəkildə entropiya, entalpiya və Gibbs enerjisini hesablanmış qiymətləri verilib.

**Şəkil 3**

Xüsusi istilik tutumu, entropiya, entalpiya və Gibbs enerjisiniñ temperatur asılılıqları

Göründüyü kimi $C_p(T)$ asılılığında görünən piklərə uyğun temperaturlarda entropiya və Gibbs enerjisi sıçrayışla dəyişir. $785\div850\text{K}$ bölümündə $C_p(T)$ asılılığı λ şəklindədir. Qeyd edək ki, $80\div800\text{K}$ temperatur bölümündə elektrik keçiriciliyi

1. A.Müller, M.Wilhem. *Über Den Gerichteten Einbau von Schwermetall phasen in A^3B^5 -verbindungen*“(die eutektika GaSb-CrSb , $\text{GaSb-FeGa}_{1,3}$, $\text{GaSb-CoGa}_{1,3}$, InAs-CrAs , und InAs-FeAs , J. Phys. Chem. Solids, **26** (1965) 2029-2035.
2. Y.Umehara, S.Koda, *Structure of a unidirectionally solidified GaSb-CrSb eutectic alloy*, J.Japan Inst. Metals, **50** (1986) 666-670.
3. M.I.Aliyev, A.A.Khalilova, D.H.Araslı, R.N.Rəhimov, M.Tanoglu, L.Ozyuzer, *Features of electron and phonon processes in GaSb-FeGal.3 eutectics* J.Phys.D: Appl. Phys., **36** (2003) 2627-2633.
4. R.N.Rəhimov, İ.X.Məmmədov, M.V.Kazimov, D.H.Arashlı, A.Ə.Xəlilova. *GaSb-CrSb evtektik kompozitin alınması və strukturu*. Journal of Qafqaz University-Physics, **1 №2** (2013) 166-168.
5. J.DijkstraTS, C.F.van Bruggeni, C.Haasi, R.A. de Grooti. *Electronic band-structure calcula-*

və Holl əmsalı tədqiq olunarkən $502\div525\text{K}$ bölümə yükdaşıyıcıların işarəsinin dəyişməsi, $650\div700\text{K}$ bölümündə isə elektrik keçiriciliyin temperatur asılılığında əyilmə müşahidə olunub [7]. Gələcək işlərdə bu məsələlər araşdırılacaq.

6. Yong Liu, S.K.Bose, J.Kudrnovsky. *Magnetism and half-metallicity of some Cr-based alloys and their potential for application in spintronic devices*, World Journal of Engineering **9**, no2 (2012) 125-132.
7. D.H.Araslı, R.N.Rəhimov, M.V.Kazimov, İ.X.Məmmədov, A.A.Xəlilova, M.N.Mirzəyev, C.Ə.Nağıyev, *GaSb-CrSb evtektik kompozitin termik analizi*. Transactions of National Academy of Sciences of Azerbaijan, Series of Physics-Mathematical and Technical Sciences, Physics and Astronomy, **XXXV №2** (2015) 94-99.
8. C.Schick. *Differential Scanning Calorimetry (DSC) of semicrystalline polymers*. Anal Bioanal Chem (2009) 395:1589–1611.

THERMODYNAMIC PROPERTIES OF GaSb-CrSb SEMICONDUCTIVE-METAL TYPE EUTECTIC COMPOSITE

R.N.RAHIMOV, I.Kh.MAMMADOV, M.V.KAZIMOV, D.H.ARASLY, A.A.KHALILOVA

The heat flow change and specific heat capacity of GaSb-CrSb eutectic composite in the $200\div900\text{K}$ temperature range have been investigated. Exothermic peaks at the 516K and 690K and endothermic peak at the 868K are observed. The temperature dependence of enthalpy, entropy and Gibbs energy are calculated from the specific heat capacity expressed by polynomial expressions in the $T_1=300\text{K}\div502\text{K}$, $T_2=525\text{K}\div652\text{K}$, $T_3=705\text{K}\div785\text{K}$ temperature ranges.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭВТЕКТИЧЕСКОГО КОМПОЗИТА GaSb-CrSb ТИПА ПОЛУПРОВОДНИК-МЕТАЛЛ

P.Н.РАГИМОВ, И.Х.МАМЕДОВ, М.В.КЯЗЫМОВ, Д.Г.АРАСЛЫ, А.А.ХАЛИЛОВА

Исследованы изменения теплового потока и удельная теплоемкость эвтектического композита GaSb-CrSb в области температур $200\div900\text{K}$. При 516K и 690K наблюдаются экзотермические пики, а при 868K – эндотермический. Теплоемкость при $T_1=300\text{K}\div502\text{K}$, $T_2=525\text{K}\div652\text{K}$, $T_3=705\text{K}\div785\text{K}$ выражена полиномиальными формулами, рассчитаны температурные зависимости энтропии, энтальпии и энергии Гиббса.

Редактор: проф. С.И.Мехтиева

UOT 621.315.592

**ŞÜŞƏVARİ SiO_2 ƏSASINDA İKİ VƏ ÜÇ KOMPONENTLİ
ŞÜŞƏYƏBƏNZƏR SİSTEMLƏRİN AŞAĞI TEMPERATURLarda İSTİLİK
TUTUMUNUN ANOMALİYASI**

N.N.ƏLİYEV

*Azərbaycan Tibb Universiteti
AZ1007, Bakı şəhəri, Bakıxanov küçəsi, 23
nusreddin.aliyev@mail.ru*

Daxil olub: 18.05.2015

Çapa verilib: 22.06.2015

Açar sözlər: istilik tutumu, anomaliya, Debay nəzəriyyəsi, koordinasiya ədədi, kvazilocal rəqslər.

REFERAT

Şüşəyəbənzər $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{SiO}_2-\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ və $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ sistemlərdə 5÷30K temperatur bölümündə $C(T)/T^3$ – asılılığının gedisində anomaliya müşahidə olunmuşdur. Müəyyən edilib ki, həmin sistemlərin $C(T)/T^3$ funksiyası üçün maksimumların yeri həmin sistemlərdə ikinci və üçüncü komponentin konsentrasiyasından və kimyəvi tərkibindən asılı olaraq yüksək temperatur tərəfə cürüşür. Bu sistemlərdə müşahidə olunan anomaliya onlarda kvazilocal rəqslərin mövcudluğu ilə bağlıdır.

GİRİŞ

Şüşəvari materiallarda mövcud olan kiçik energetik həyəcanlanmalar ($1÷10\text{ev}$) kvazilocal rəqslərin yaranmasına səbəb olur və həmin materialların aşağı temperaturlarda fiziki xassələrində, həmcinin istilik tutumunda müşahidə olunan anomaliyaları yaradır [1-3]. Belə ki, şüşəyəbənzər SiO_2 -nin, $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3$ və $\text{SiO}_2-\text{GeO}_2$ sistemlərində istilik tutumunun ($5÷30\text{K}$) temperatur bölümündə $C(T)/T^3$ asılılığı gedisində anomaliyanın olması göstərilmişdir [4].

Neytronların səpilməsi metodu ilə müxtəlif amorf materialların tədqiqi göstərir ki, ($5÷30\text{K}$) temperatur bölümündə rəqs halının enerji sıxlığı Debayın $g_d(\omega)$ -dan fərqli olaraq $g_d(\omega) \sim \omega^2$ – şəklində ifadə edilir. Bu anomaliya bütün tədqiq olunan şüşəvari materiallarda, tərkibindən asılı olmayaraq baxılan temperatur bölümündə əlavə istilik tutumunun yaranmasına səbəb olur [1]. Habelə, KS (kombinasion səpilmə) və İQ (infraqırmızı spektr) spektrində $10÷100\text{sm}^{-1}$ tezlik və $5÷30\text{K}$

temperatur bölümündə istilik tutumunun temperatur asılılığının anomaliyası nizamsız quruluşa malik materialların quruluş xüsusiyyəti ilə bağlıdır [3].

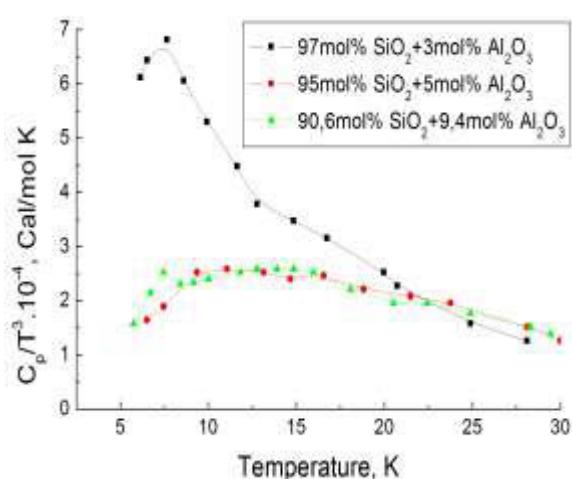
NƏTİCƏ VƏ MÜZAKİRƏLƏR

Şüşəyəbənzər $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{SiO}-\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ və $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ sistemlərində istilik tutumunun temperatur ($5-300\text{K}$) və tərkibdən asılılığı öyrənilmişdir [5, 6]. Hazırkı işdə isə həmin sistemlərdə istilik tutumunun $5-30\text{K}$ temperatur bölümündə $C(T)/T^3$ asılılığı tədqiq edilmiş və anomaliya müşahidə olunmuşdur. Belə ki, $C(T)/T^3$ -asılılığının maksimumun yeri və amplitudu həmin sistemlərdə ikinci komponentin konsentrasiyasından, kimyəvi tərkibindən asılı olaraq şüşəvari SiO_2 -yə nəzərən müxtəlif olması, yəni əsasən yüksək temperatur bölümünü tərəf sürüşməsi göstərilib (bax: Şəkil 1, 2 və 3, Cədvəl).

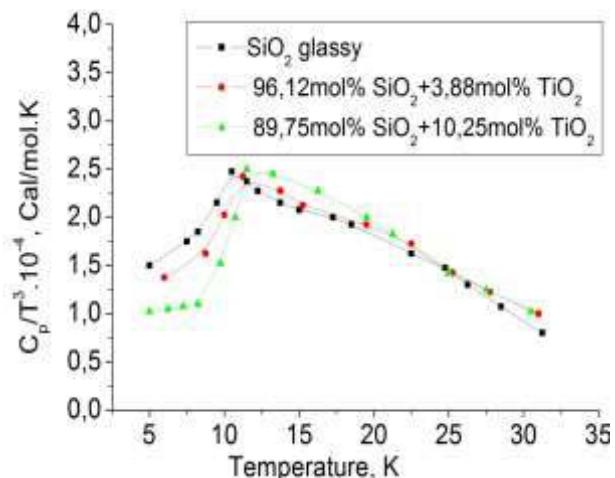
Cədvəl 1

Şüşəyəbənzər $\text{SiO}_2\text{--Al}_2\text{O}_3$, $\text{SiO}_2\text{--TiO}_2$, $\text{SiO}_2\text{--B}_2\text{O}_3\text{--Na}_2\text{O}$ və $\text{SiO}_2\text{--Al}_2\text{O}_3\text{--Na}_2\text{O}$ sistemlərinin $C(T)/T^3$ asılılığındakı “pik”ə uyğun temperaturlar.

Nö	Maddə	Temperatur, K
	SiO_2	10
	97,00 mol % SiO_2 + 3,00 mol % Al_2O_3	12
	95,00 mol % SiO_2 + 5,00 mol % Al_2O_3	10
	90,60 mol % SiO_2 + 9,40 mol % Al_2O_3	11
	96,12 mol % SiO_2 + 3,88 mol % TiO_2	11
	89,75 mol % SiO_2 + 10,25 mol % TiO_2	13
	97,00 mol % SiO_2 + 2,50 mol % B_2O_3 + 0,50 mol % Na_2O	9,6
	97,00 mol % SiO_2 + 1,00 mol % B_2O_3 + 2,00 mol % Na_2O	8,5
	97,00 mol % SiO_2 + 0,50 mol % B_2O_3 + 2,50 mol % Na_2O	8
	93,90 mol % SiO_2 + 1,00 mol % Al_2O_3 + 5,0 mol % Na_2O	8,4
	93,90 mol % SiO_2 + 3,00 mol % Al_2O_3 + 3,10 mol % Na_2O	9
	93,90 mol % SiO_2 + 5,00 mol % Al_2O_3 + 1,10 mol % Na_2O	11



Şəkil 1
Şüşəvari $\text{SiO}_2\text{--Al}_2\text{O}_3$ sisteminin $C(T)/T^3(T)$



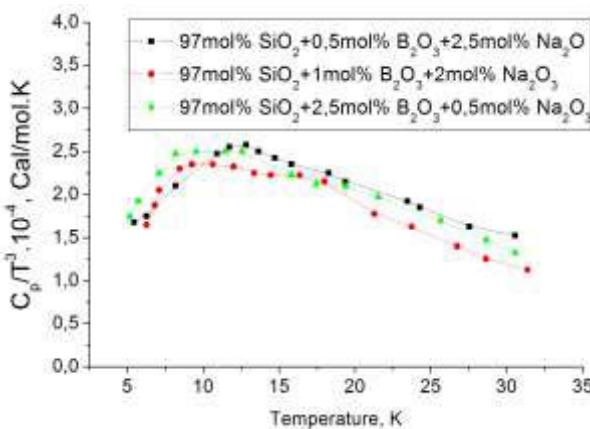
Şəkil 2
Şüşəvari $\text{SiO}_2\text{--TiO}_2$ sisteminin $C(T)/T^3(T)$

Göstərildiyi kimi $\text{SiO}_2\text{--Al}_2\text{O}_3$ və $\text{SiO}_2\text{--TiO}_2$ şüşəvari sistemlərdə tərkibində Al və Ti atomlarının rolundan asılı olaraq istilik tutumunun izotermərinin gedisindəki anomali xarakteri SiO_4 tetraedrləri ilə AlO_4 oktaedrləri və TiO_4 tetraedrlərinin öz aralarındaki yaranmış rabitələrin (Si--O--Si , Si--O--Al və Si--O--Ti) həndəsi xüsusiyyətinə əsaslanır [5]. Yəni SiO_2 -nin qəfəsinə daxil olan Al və Ti atomları həndəsi olaraq onun Si-O-Si bucağının

dəyişməsinə və SiO_2 -də anion karkasın rabitələrinin mütəhərrikliyinin artmasına səbəb olur və ehtimal ki, SiO_2 -də ~10K temperatur ətrafında istilik tutumunun anomaliyasını yaradır.

Müəlliflərin [6,7] xassənin tərkibdən asılılıq fikrinə uyğun olaraq $\text{SiO}_2\text{--B}_2\text{O}_3\text{--Na}_2\text{O}$ və $\text{SiO}_2\text{--Al}_2\text{O}_3\text{--Na}_2\text{O}$ şüşəvari sistemlərində B və Al atomlarının koordinasiya ədədinin dəyişməsinə əsaslanaraq istilik tutumunun konsentrasiyadan asılılığını izah etmişik [8, 9]. Göstərilib ki, natriumbo-

rosilikat (NBS) və natriumalüminiumsilikat (NAS) tərkibində az miqdarda Na_2O aşqarının olması həmin materialların quruluşunda borooksigen və alminiumoksigen karkaslarının yenidən qurulmasına səbəb olur. Belə ki, B və Al atomlarının bir qismi tetraedrik mövqedə olaraq onlarda Si–atomunu izomorf əvəz edir, qalan B və Al atomları isə oktaedrik mövqedə qalır və [6,7] işdə göstərilən fikrə uyğun gəlir.



Şəkil 3

Şüşəvari $\text{SiO}_2 - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{Na}_2\text{O}$ sisteminin $C(T)/T^3(T)$

Bu zaman körpü təşkil etməyən bütün oksigen atomları BO_4 və AlO_4 tetraedrlərinə daxil olur və hər bir Na ionları BO_4 və AlO_4 tetraedrlərində yerləşir. Bu isə şüşə karkasında kimyəvi rabitənin möhkəmlənməsinə gətirir və şüşə karkasında $[\text{SiO}_{4/2}]$, $[\text{BO}_{4/2}]$ Na və $[\text{AlO}_{4/2}]$ Na düyünləri arasında izomorfizmin mövcudluğunu təsdiq edir. Bu halda belə şüşənin anion

1. *Amorphous solids low-temperature properties*. Ed W.A.Phillips N.Y., (1981) 180
2. J.C.Philips. *T³ spesifikasi heat anomaly in network solids*, *Phys.Rev.*, **32** (1985) 5356-5361.
3. U.Buchnam et al., *Low-frequency modes in vitreous silic*, *Phys.Rev.*, **B.34** (1986) 5665-5673.
4. N.N.Əliyev. *Şüşəvari $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3$ və $\text{SiO}_2-\text{GeO}_2$ sistemlərinin aşağı temperaturlarda istilik tutumunun anomaliyası*, *Transactions of National Academy of Sciences of Azerbaijan, Series of Physics-Mathematical and Technical Sciences, Physics and Astronomy*, **XXXIV** N 2 (2014) 125-129.
5. K.K.Mamedov, A.B. Abdullaev, B.Z. Shalumov, M.I. Mekhtiyev, M. Aldjanov, N.N. Aliyev, D.O. Gumbatov. *Теплоемкость и термодинами-*

quruluşu silisiumborooksigen və silisium alüminiumoksigenin BO_4 və AlO_4 tetraedrlərində B–O və Al–O vahid rabitənin enerjisi uyğun olaraq $80 \div 100$ kkal/mol təşkil edir ki, bu da təqribən SiO_4 -tetraedrində Si–O rabitəsinin enerjisindən $\sim 15\%$ aşağıdır. Nəticədə SiO_2 -anion karkası rabitələrinin mütəhərrikliyinin artmasını yaradır.

Beləliklə, B, Al və Ti atomları SiO_2 -nin karkasına daxil olaraq Si-atomlarını əvəz edərək Si–O–B, Si–O–Al və Si–O–Ti rabitələrinin yaranmasına, Si–O–Si bucaqlarının dəyişməsi hesabına SiO_2 anion karkasının rabitələrinin mütəhərrikliyinin artmasına səbəb olur. Bu da çox ehtimal ki, kvazilocal rəqslerin yaranmasına və ($5 \div 30$ K) temperatur bölümündə göstərilən sistemlərin istilik tutumunun anomaliyasına səbəb olur.

ALINAN NƏTİCƏLƏR

Şüşəvari $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{SiO}_2-\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ və $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ sistemlərində ($5 \div 30$ K) temperatur intervalında $C(T)/T^3$ asılılığındakı “pik”的 olması nizamsız quruluşa malik materialların quruluş xüsusiyyəti, kvazilocal rəqslerin həyəcanlanması ilə bağlıdır. Müəyyən edilib ki, $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ və $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ sistemlərində $C(T)/T^3$ asılılığındakı maksimumların yeri ikinci və üçüncü komponentlərin konsektivasiyından asılı olaraq B və Al kationlarının koordinasiyasının dəyişməsinə əsasən yüksək temperatur bölümünə tərəf sürüşməsi cüzdür.

- ческие свойства стеклообразных систем $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$ и $\text{SiO}_2-\text{TiO}_2$ при низких температурах, *Физика хим.стекла*, **11** (1985) 536-541.
6. Н.Н.Алиев, Г.Т.Ахмедли, Ф.Ю.Алиев. *Теплоемкость натриевоборосиликатных стекол при низких температурах*, *ЖФХ*, **66** (1992) 417-422.
 7. Н.Н.Алиев, А.Б.Абдуллаев, Б.З.Шалумов, С.С.Дьяконов. *Концентрационные зависимости теплоемкости бинарных стекол на основе диоксида кремния при низких температурах*, *Изв.АН ССР Неорган.материалы*, **24** (1988) 124-127.
 8. В.В.Горбачев, В.Н.Петряков и др. *Координационное состояние бора в натриевоборосиликатных стеклах по данным рентгеновской и*

- KP спектроскопии, Физика и химия стекла, 11* (1985) 410-413.
9. Т.И.Песина, Л.Г.Байкова, В.Л.Пух, И.И.Новак, М.Ф.Киренчко. *Прочность и структурные*
- особенности стекол системы $\text{Na}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$, Физика и химия стекла, 12* (1986) 26-31.

ANOMALY IN HEAT CAPACITY OF $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{SiO}_2-\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ and $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ GLASS-LIKE SYSTEMES AT LAW TEMPERATURES

N.N.ALIYEV

The anomaly “peak” has been observed at the 5÷30K temperature range in $C(T)/T^3$ dependence fo glass like $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{SiO}_2-\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ and $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ system. It has been found that for the $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{SiO}_2-\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ and $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ systems the makxima depend on the concentration and chemical composition of the second and third components and displace towards higher temperature region. The observed anomaly for the heat capacity in these materials has been probably related to the existence of the quasi-local vibrations.

АНОМАЛИЯ ТЕМЛОЕМКОСТИ СТЕКЛООБРАЗНЫХ СИСТЕМ $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{SiO}_2-\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ и $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Н.Н.АЛИЕВ

Для стекловидных $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{SiO}_2-\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ и $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ систем в зависимости $C(T)/T^3$ в области температуры 5÷30К наблюдены аномалии. Показано, что для систем $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{SiO}_2-\text{TiO}_2$, $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ и $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Na}_2\text{O}$ максимумы функции $C(T)/T^3$ зависят от концентрации второго и третьего компонента и смещаются в сторону высоких температур.

Редактор: акад. Дж.Абдинов

UOT 621.315.592

K_{0,965}Rb_{0,035}NO₃ KRİSTALLARINDA QURULUŞ FAZA ÇEVRİLMƏLƏRİ

V.İ.NƏSİROV, R.B.BAYRAMOV

Azərbaycan MEA-nın Fizika İnstitutu

AZ 1143, Bakı şəh., H.Cavid pr., 131

bayramov.razim@mail.ru

Daxil olub: 18.05.2015

Çapa verilib: 22.06.2015

Açar sözlər: polimorfizm, enantiotrop, modifikasiya, monokristal, polimorf çevrilmə.

REFERAT

Optik mikroskopiya metodu ilə K_{0,965}Rb_{0,035}NO₃ monokristallarında II↔III polimorf çevrilmələri zamanı yeni modifikasiya kristallarının böyümə morfolojiyası tədqiq olunmuş, II və III modifikasiya kristalları arasında tarazlıq temperaturu təyin edilmişdir (T=452±0,5K). Difraktometrik üsulla polimorf modifikasiyaların kristal qəfəsi parametrləri təyin olunmuş və müəyyən edilmişdir ki, tədqiq olunan nümunələrdə polimorf çevrilmələr enantiotrop olub, monokristal↔monokristal tiplidir.

GİRİŞ

Qələvi metalların nitrat birləşmələrində polimorf çevrilmələrin tədqiqi böyük elmi əhəmiyyətə malik olduğu kimi, həm də praktik əhəmiyyətlidir. Belə ki, bu proses bir tərəfdən qarışq tərkibli monokristalların alınma texnologiyası ilə six bağlıdır. Digər tərəfdən isə tədqiq olan maddələr partladıcı maddələrdə, xüsusi silə pirotexnikada, dərman obyektlərində geniş tətbiq olunur.

Otaq temperaturundan ərimə temperaturuna kimi kalium nitrat kristallarında iki, rubidium nitrat kristallarında isə üç polimorf çevrilmə baş verir. Həmin maddələrin polimorf modifikasiyalarının kristal quruluşu, kristal qəfəsi parametrləri, fəza qrupu və mövcudolma temperatur oblastları barədə məlumat Cədvəl 1-də verilmişdir.

Qələvi metalların nitrat birləşmələrində, o cümlədən kalium və rubidium nitrat monokristallarında polimorf çevrilmələrin mexanizminin araşdırılmasına çoxsaylı işlər olunmuşdur [8-11]. [12]-də K_{1-x}Rb_xNO₃ kristallarında kombinasiyalı səpilmə spektroskopiyası metodu ilə polimorf çevrilmələr, [14-16]-də kalium nitratda gümüş və sezium nitratın bərk məhlullarında polimorf çevrilmələrin

mexanizmi tədqiq olunmuş və bir sıra maraqlı nəticələr alınmışdır.

KNO₃ və RbNO₃-ün bərk məhlullarında quruluş çevrilmələrinin mexanizmini araşdırmaq məqsədilə təqdim olunan bu işdə K_{0,965}Rb_{0,035}NO₃ kristallarında optik mikroskopik və rentgenoqrafik tədqiqatlar aparılmışdır. Həmin kristallarda bu tip tədqiqatlar indiyə kimi aparılmamışdır.

TƏCRÜBİ HİSSƏ

Tədqiq olunan K_{0,965}Rb_{0,035}NO₃ kristalları otaq temperaturunda KNO₃ və RbNO₃ birləşmələrinin suda məhlulundan izotermik kristallaşma yolu ilə alınmışdır. Alınan kristallar inyəvari və müstəvi lövhələr şəklində olmuşdur. İnyəvari kristalların boyu [001] kristalloqrafik istiqamətində yönəlmüş və ölçüləri ~1×0,5×10mm olmuşdur.

Morfoloji tədqiqatlar xüsusi qızdırıcı ilə təmin edilmiş MİN-8 markalı optik polyarizasiya mikroskopunda [17]-də verilən metodika üzrə aparılmışdır. Polimorf çevrilmə zamanı kristal böyüməsi "Levenhuk C310 NK" tipli kinokamera vasitəsilə qeydə alınaraq kompyuterlə müşahidə edilmişdir. Nümunənin temperaturu ucu birbaşa onun səthinə toxunan termocüt vasitəsilə ölçülümdür. Temperatur

ölçmələrinin dəqiqliyi 100⁰C-də ±0,5⁰C olmuşdur.

Rentgendifraksiya tədqiqatları “Bruker” firmasının D8 ADVANCE tipli ovuntu difraktometrində, 40kV, 40mA rejimdə, CuK_α ($\lambda=1,5406\text{\AA}$) şüalanmada, TTK450K temperatur kamerasında 300< T <723K temperatur intervalında aparılmışdır. Difraksiya eksolunmaları 20⁰≤2θ≤80⁰ bucaq intervalında aparılmış, alınan nəticələrin indekslənməsi TOPAS programı ilə aparılırlarq EVA programı ilə dəqiqləşdirilmişdir. Morfoloji tədqiqatlar zamanı hər şeydən əvvəl II və III modifikasiya kristalları arasındakı tarazlıq temperaturu təyin edilmiş və $T_0=452\pm0,5\text{K}$ alınmışdır.

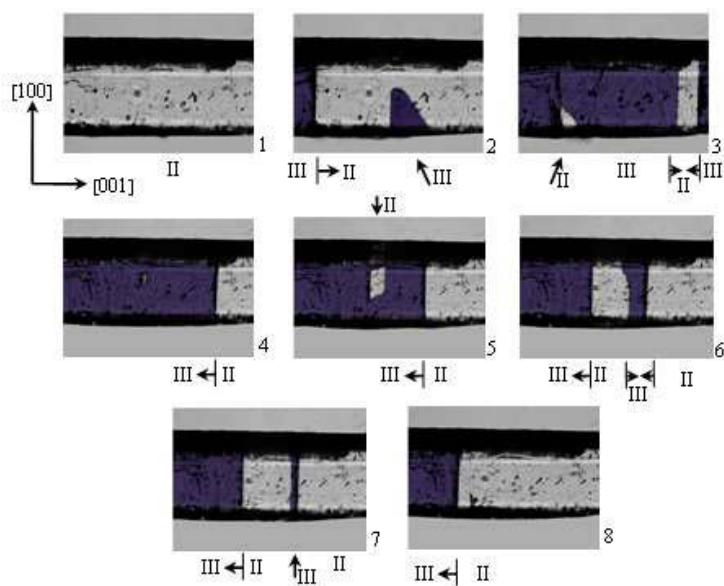
fikasiya kristalları arasındakı tarazlıq temperaturu təyin edilmiş və $T_0=452\pm0,5\text{K}$ alınmışdır.

Optik mikroskop altında aparılan müşahidələr göstərmüşdir ki, tədqiq olunan kristalda II→III polimorf çevriləməsi həmişə $T>T_0$ temperaturda ana kristal daxilində yeni kristalın rüşeyminin yaranması və böyüməsi ilə baş verir.

Cədvəl 1

Kalium və rubidium nitratda polimorf modifikasiyaların kristalloqrafiyası və mövcudolma temperatur oblastları

Maddə	Sinqoniya	Kristal qəfəsin parametrləri			Fəza qrupu	Mövcud olma temperatur intervalı T, K	Ədəbiyyat
		a, Å	b, Å	c, Å			
KNO ₃	rombik	4.41	9.17	6.42	Pnma	300–400	1
	romoedrik	7.41	-	10.71	$R\bar{3}m$	400–610	2
RbNO ₃	romoedrik	4.35	-	9,11	$R\bar{3}m$	383–397	3
	kubik	7.32	-	-	Fm3m	564–587	4
	romoedrik	5.48	-	10.71	R3m	492–564	5
	kubik	4.30	-	-	Pm3m	437–492	6
	triqonal	10.48	-	7.45	P3 ₁ m	<437	7



Şəkil 1

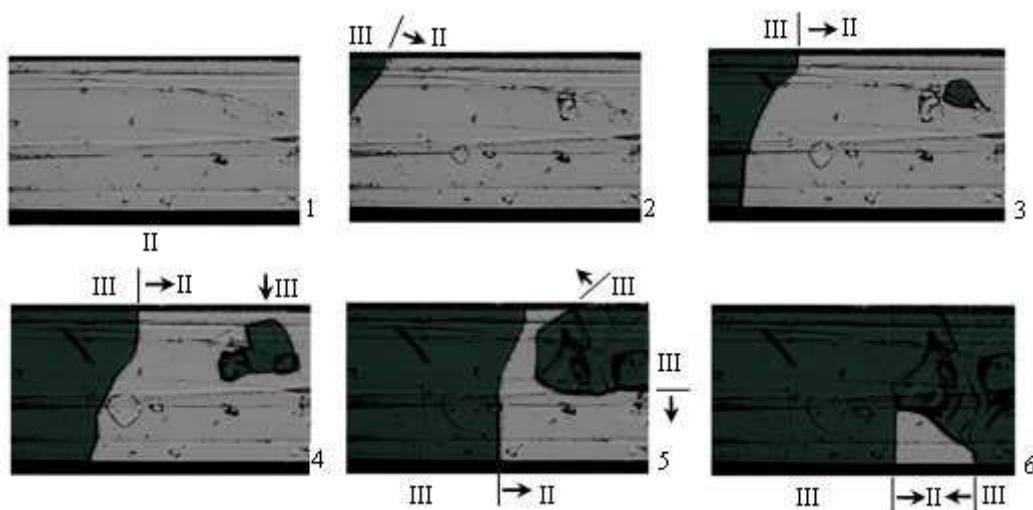
K_{0,965}Rb_{0,035}NO₃ kristallarında II↔III çevriləmə zamanı III və II modifikasiya kristalının böyümə morfologiyasını əks etdirən mikrofotoqrafiyalar. Böyütmə 90 dəfə.

Baxılan kristalda temperatur yubanması $\Delta T \sim 1K$ təribində olur. $\Delta T = T_{\text{çev}} - T_0$, burada $T_{\text{çev}}$ -çevrilmə, T_0 -isə tarazlıq temperaturudur. Yeni yaranan kristal rüseyimlərinin sayı ana kristalın defektlik dərəcəsindən və temperaturdan asılıdır. Şəkil 1-də ana kristal daxilində yeni fazanın 3 rüseyiminin əmələ gəlməsi və böyüməsi ilə baş verən çevrilmə verilmişdir. Şəkil 1, foto 2-dən görünür ki, ikinci rüseyim əvvəlcə ana kristalın [100] istiqamətində böyükür və bu istiqamətdə böyümə başa çatıqdan sonra [001] kristalloqrafik istiqamətdə davam edir.

Əks proses, yəni III \rightarrow II çevrilmə $T_{\text{çev}} < T_0$ temperaturda baş verir və bu çevrilmə də ana kristal daxilində yeni yaranan kristalın rüseyiminin yaranması və böyüməsilə baş verir. Şəkil 1, foto 5-də göründüyü kimi III \rightarrow II çevrilməsi zamanı da III-modifikasiya kristalının rüseyimi əvvəlcə [100] istiqamətində və daha sonra [001] istiqamətində böyükür (Şəkil 1, foto 6).

Alınan bu nəticə göstərir ki, müvafiq temperatur rejimini seçməklə çox rüseyimli keçidin əksi tək rüseyimli ola bilər. Bu faktın özü müvafik şərait yaradıldıqda polikristal \rightarrow monokristal keçidin mümkünlüyünü göstərir.

Şəkil 2-də II-modifikasiya kristalı daxilində III-modifikasiya kristalının 2 rüseyimlə böyüməsini əks etdirən mikrofotoqrafiyalar verilmişdir. Şəkil 2, foto 2-dən göründüyü kimi birinci rüseyim ana kristalın sol küncündə yaranmış və ana kristalın [001] istiqamətində böyüməyə başlamışdır. Sağ tərəfdə yaranan ikinci rüseyim isə (Şəkil 2, foto 4,5) sürətlə eyni zamanda hər iki istiqamətdə [100] və [001] kristalloqrafik istiqamətlərində böyüməyə başlamışdır. Nəticədə II \rightarrow III polimorf çevrilmə zamanı ana kristal daxilində yeni kristalın iki rüseyimli böyüməsi müşahidə olunmuşdur. Onu da qeyd edək ki, III və II fazaların sərhəddinin müxtəlif ana kristalda eyni formaya malik olması diqqəti çəkir.



Şəkil 2

$K_{0,965}Rb_{0,035}NO_3$ kristallarında II \rightarrow III çevrilmə zamanı III-modifikasiya kristalının böyümə morfologiyasını əks etdirən mikrofotoqrafiyalar. Böyütmə 90 dəfə.

Rentgenoqrafik tədqiqatlar göstərmüşdür ki, II \leftrightarrow III çevrilmələri zamanı II və III-modifikasiya kristalları arasında sərt kristalloqrafik istiqamət əlaqələri mövcuddur.

Bəşliklə, aparılan morfoloji tədqiqatlar göstərmüşdür ki, tədqiq olunan nümunələrdə II \leftrightarrow III polimorf çevrilmələri yeni modifikasiya

kristalı rüseyiminin ana kristal daxilində yaranması və böyüməsilə baş verir. Aparılan müşahidələrə görə baxılan kristallarda quruluş çevrilmələri enantiotrop olub, monokristal \leftrightarrow monokristal tiplidir.

Otaq temperaturunda ($T=300K$) və normal təzyiqdə II-modifikasiya kristallarından

alınan difraksiya əks olunmaları rombik qəfəsdə indekslənərək kristal qəfəsi parametrləri üçün: $a=5,417$, $b=9,168$ və $c=6,432\text{ Å}$ alınmışdır. Fəza qrupu $Pmcn$ olmuşdur. Otaq temperaturunda aparılan çəkilişdən sonra difrakto metrin qızdırıcı kamerası qoşulmuş və 20-30K-dən bir çəkilişlər aparılmışdır. Çəkilişdən qabaq kristal verilmiş temperaturda 30dəq saxlanılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, $T>T_0=450\text{ K}$

temperaturda tədqiq olunan nümunədə quruluş çevriləməsi baş verir və bu temperaturda alınan difraksiya əks olunmaları $\bar{R}\bar{3}m$ fəza qrupu, $a=5,413$, $c=9,716\text{ Å}$ parametrlər heksa qonal qəfəsdə indekslənir. $T=300\text{ K}$ və $T=450\text{ K}$ temperaturlarda alınan difraktoqramların hesabatı cədvəl 2-də verilmişdir.

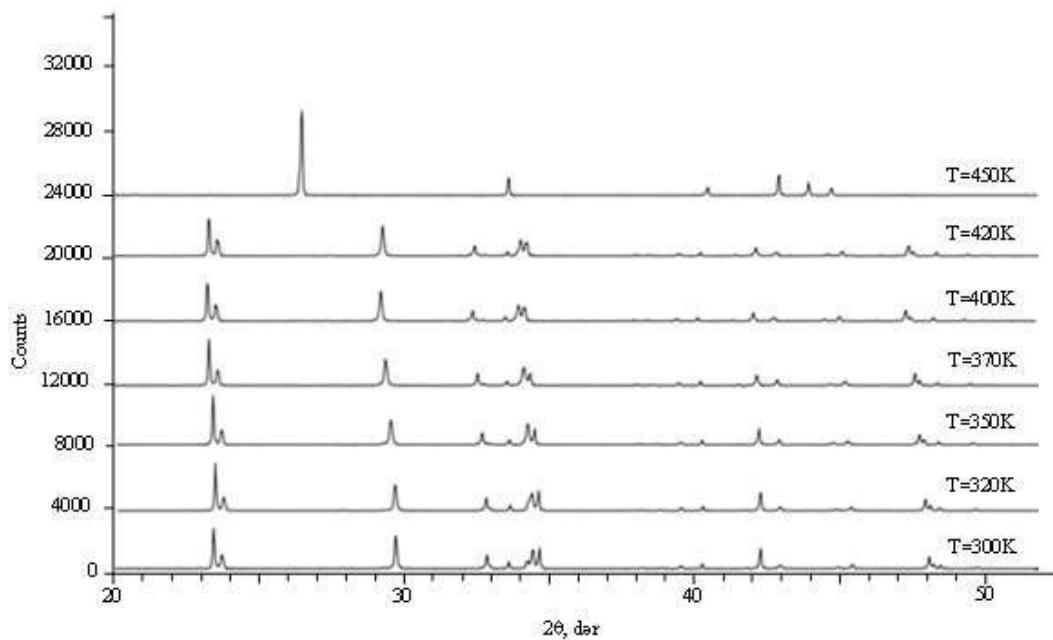
Cədvəl 2

K_{0,965}Rb_{0,035}NO₃ kristallarında alınan difraktoqramların hesabatı. Şüalanma: CuK α ($\lambda_{\alpha}=1.5406\text{ Å}$, 40kV, 40mA)

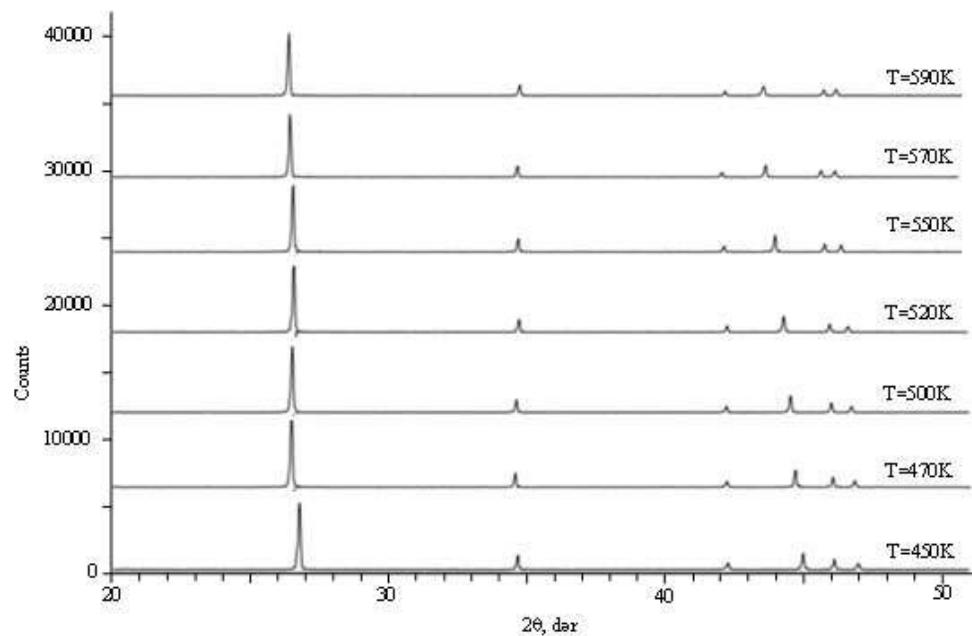
T _{eks.} , K	2θ	$\frac{I}{I_0}$ %	d _{eks.} , Å	hkl	Elementar qəfəs parametrləri, Å
300	19,012	17,6	4,66411	110	Rombik $a=5,417\text{ Å}$ $b=9,168\text{ Å}$ $c=6,432\text{ Å}$ fəza qr. Pmcn
	19,346	21,5	4,58445	020	
	23,542	100	3,77599	111	
	23,815	35,7	3,73335	021	
	29,405	90,8	3,03503	012	
	32,344	40,1	2,76564	102	
	32,406	13,4	2,76056	031	
	33,044	20,7	2,7087	200	
	33,642	22,8	2,6619	130	
	33,826	57,5	2,64781	112	
	34,022	62,8	2,63298	022	
	39,273	13,6	2,29222	040	
	41,139	59,9	2,19242	221	
	41,801	10,7	2,15923	041	
	43,652	5,2	2,07185	202	
	44,127	12,3	2,05068	132	
	46,58	35,1	1,94821	113	
	46,731	12,8	1,94228	023	
	48,158	4,8	1,888	222	
	54,691	3,3	1,67691	151	
	58,196	4,2	1,58399	014	
450	60,532	16,9	1,52834	152	Heksagonal $a=5,413\text{ Å}$ $c=9,716\text{ Å}$ fəza qr. $\bar{R}\bar{3}m$
	60,54	16,9	1,52815	060	
	26,359	100	3,37847	10-2	
	33,04	21,8	2,70899	110	
	41,77	25,2	2,16077	104	

Tədqiq olunan kristallarda difraksiya mənzərəsi şəkil 3-də verilmişdir. Temperaturun sonrakı artırılması nəticəsində ərimə tempe-

raturuna kimi difraksiya mənzərəsində heç bir dəyişiklik müşahidə olunmamışdır (Şəkil 4).



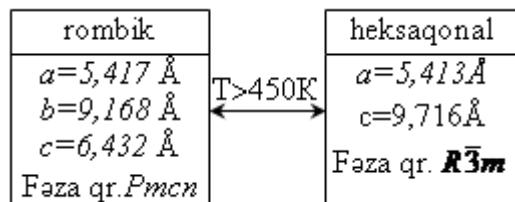
Şəkil 3
K_{0,965}Rb_{0,035}NO₃ kristallarında müxtəlif temperaturlarda çekilmiş difraksiya mənzərəsi



Şəkil 4
K_{0,965}Rb_{0,035}NO₃ kristallarında müxtəlif temperaturlarda çekilmiş difraksiya mənzərəsi

NƏTİCƏLƏR

Beləliklə, K_{0,965}Rb_{0,035}NO₃ kristallarında otaq temperaturundan ərimə temperaturuna kimi quruluş faza çevrilməsinin aşağıdakı sxem üzrə baş verdiyi müəyyən edilmişdir:



Çoxsaylı mikroskopik və rentgenoqrafik tədqiqatlar göstərmişdir ki, KNO₃ kristallarında III-modifikasiya kristalları soyudularkən II-modifikasiyaya keçməmiş müşahidə olunan romboedrik qəfəslə I-modifikasiya [10] mövcud

1. D.A.Edward, *A determination of the complecte crystal structure of potassium nitrate*, Z.Krist., **80** (1943) 154-158.
2. P.E.Tahvonen, *X-ray investigation of molecular rotation in potassium nitrate crystal*, Ann. Acad. Sci. Fennical, ser. A, **44** (1947) 20-25.
3. P.W.Bridgman, *The velocity of polymorphic change between solid*, Proc. Am. Acad. Arts. Sci., **52** (1916) 57-88.
4. R.N.Brown, A.C.McLaren, *The thermal transformation in solid rubidium nitrate*, Acta Cryst., **15** (1962) 974-978.
5. M.Shamsuzzona, B.W.Lucas, *Polymorphs of rubidium nitrate and their crystallographic relationships*, Canad J.Chem. **66** (1988) 819-823.
6. R.N.Brown, A.C.McLaren, *On the mechanism of the thermal transformation in solid rubidium and ammonium nitrate*, Proc. Roy. A, **266** (1962) 329-343.
7. L.Pauling, J.Sherman, *Note On the crystal structure of rubidium nitrate*. J. Chem. Phys., **4** (1966) 1318-1325.
8. S.W.Kennedy, M.Odlyha, *Polimorphic transformation II→I in potassium nitrate. Multiple orientation*, Aust. J.Chem., **27** (1974) 1121-1124.
9. Y.G.Asadov, V.İ.Nasirov, G.A.Jabrailova. *Mor-phology of crystal at polymorphic transformation in KNO₃, AgNO₃ and NH₄NO₃ single crystals*, J. Crystal Growth, **15** (1972) 45-50.

deyildir. Aparılan təcrübələrin təhlili nəticəsində belə nəticəyə gəlmək olar ki, K_{0,965}Rb_{0,035}NO₃ kristallarında $T > 450\text{K}$ temperaturda rombik→heksaqaonal quruluş faza çevrilməsi baş verir. Bu çevrilmə enentiotrop olub, monokristal↔monokristal tiplidir. Tədqiq olunan kristallarda II↔III çevrilmələri ana kristal daxilində yeni kristalın kristal rüseyiminin yaranması və böyümməsilə baş verir və qarşılıqlı çevrilən modifikasiya kristalları arasında sərt kristalloqrafik istiqamət əlaqələri saxlanılır.

Tədqiqat prosesinin gedişində və alınan nəticələrin müzakirəsində göstərdiyi maraq və tövsiyələrinə görə 4 sayılı laboratoriyanın elmi işçisi İ.R.Əmiraslanova dərin minnətdarlığımızı bildiririk.

10. Ю.Г.Асадов, В.И.Насиров, *О морфологии роста кристаллов при $\alpha \leftrightarrow \beta$, $\beta \leftrightarrow \gamma$ и $\gamma \leftrightarrow \alpha$ превращениях в нитрате калия*, Кристалло-графия, **6** (1970) 1204-1208.
11. Y.Shinnaka, S.Yamamoto, *X-ray study of Orientational Disorder in Cubic RbNO₃*, J. Phys. Soc. Jpn. **50** (1981) 2091-2094.
12. H.Zamali, M.Jemal, *Phase Diagrams of Binary Systems: AgNO₃-KN₃ and AgNO₃-NaNO₃*, Journal of Phase Equilibria, **16** (1995) 235-238.
13. Ю.Г.Асадов, Э.В.Насиров, *Полиморфный переход монокристалл→монокристалл в K_{0,975}Rb_{0,025}NO₃*, Кристаллография, **5** (2010) 945-948.
14. Ю.Г.Асадов, Э.В.Насиров, Р.Дж.Альясева, *Исследованные кинетики полиморфного II→III превращение в K_{1-x}Ag_xNO₃*, Доклад НАН Азерб., **4** (2007) 37-41.
15. В.И.Насиров, А.Ф.Хазиева, Ю.Г.Асадов, *Полиморфные превращения в монокристалл→монокристалл Rb_{0,975}Cs_{0,025}NO₃*, Кристаллография, **5** (2011) 1146-1150.
16. В.И.Насиров, А.Ф.Хазиева, Ю.Г.Асадов, А.С.Амир, *Рентгенографические исследования полиморфных превращений в Rb_{0,90}Cs_{0,10}NO₃*, AMEA, Məruzələr, **2** (2011) 33-38.
17. В.И.Насиров, *Полиморфизм в оптически прозрачных кристаллах*, Баку (1997) 168.

STRUCTURAL PHASE TRANSFORMATIONS IN $K_{0.965}Rb_{0.035}NO_3$

V.I.NASIROV, R.B.BAIRAMOV

The morphology of the crystal growth during polymorphic transitions II↔III has been investigated by optical microscopy. The temperature of equilibrium between these crystal phases ($T=452\pm0.5K$) has been determined. By x-ray diffraction methods has been defined the unit cell constants before and after transitions, it has been established that the phase transition was reversible and was the transition type as single crystal to single crystal.

СТРУКТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В КРИСТАЛЛА $K_{0.965}Rb_{0.035}NO_3$

В.И.НАСИРОВ, Р.Б.БАЙРАМОВ

Методами оптической микроскопии исследованы морфология роста кристаллов при полиморфных превращениях II↔III и определена температура равновесия между этими фазами ($T=452\pm0.5K$). Методами рентгеноиской дифракции определены параметры элементарных ячеек до и после превращений, установлено, что превращение обратимо и является превращением типа монокристалл↔монокристалл.

Редактор: проф. Ю.Асадов

UOT 621.365:691.327001

ÇOXELEKTRODLU KOMPOZİTLİ ELEKTRİKQIZDIRİCILARININ ELEKTRİK VƏ KONSTRUKTİV PARAMETRLƏRİNİN HESABLANMA MODELİ

S.A.HÜSEYNOVA, T.M.XALİNA¹

Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu

AZ 1143, Bakı, H.Cavid, 131

İ. Polzunov adına Altay Dövlət Texniki Universiteti¹

Rusiya 656038, Barnaul, Lenin pr., 46

sabish1977@rambler.ru

Daxil olub: 18.05.2015

Çapa verilib: 22.06.2015

Açar sözlər: elektrofiziki və fiziki-mexaniki xarakteristikalar, elekroqızdırıcılar, çoxelektrodlu sistemlər, qızdırılan səth.

REFERAT

İşdə çoxelektrodlu aşağı temperaturlu kompozitli elektrikqızdırıcılarının elektrik istilik parametrlərinin, nəzəri qiymətləndirilməsi məsələsinə baxılmışdır. Göstərilmişdir ki, komplanar sahələr üçün ikiölçülü Laplas tənliyinə əlavə funksiya daxil etmək zəruridir. Bu funksiya harmonik olub, komplanar elektrik sahəsinin intensivlik vektorunun dekart koordinat sisteminin oxlarından biri ilə əmələ gətirdiyi bucağın funksiyasıdır

GİRİŞ

Kompozitli elektrikqızdırıcısı elektrik enerjisini istilik enerjisiniə çevirən və istənilən səthdə əvvəlcədən verilmiş ($300\div400\text{K}$) temperaturu və onun elektrofiziki və fiziki-mexaniki xarakteristikalarını təmin edə bilən qurğudur. Bu cür qızdırıcılar ümumi halda kompozit tipli rezistiv qatdan (elektrodlardan) və onları bir-birindən izolə edən qatlardan ibarət olur.

Hazırda bu qurğuların konstruksiyalarının təkmilləşdirilməsi prosesi, onlarda istifadə olunan rezistiv, keçirici və izolyasiya materiallarının texniki göstəricilərinin yaxşılaşdırılması ilə yanaşı, həm də maya dəyərinin aşağı salınmasına xidmət edir. Ona görə də bu istiqamətdə aparılan işlərin əsas məqsədi onların tətbiq sahəsində asılı olaraq elektrik sahəsinin və temperaturun səthdə paylanması ilə bağlı konkret məsələlərin həllində sistemin hər elementinin rolunun dəqiqləşdirilməsi ilə bağlıdır.

Bu cür qızdırıcılar özünün effektivliyi, kontaktların hazırlanma texnologiyasına görə bir-birindən seçilməsinə və lokal qızdırma imkanına görə xalq təsərrüfatında (xüsusən kənd təsərrüfatı obyektlərində) geniş istifadə edilir.

Bu cür qızdırıcıların nəzəri işlənməsi, layihələndirilməsi, hazırlanması və tətbiqi bir çox məqalələrdə özəksini tapmışdır (məsələn [1-3]). Hazırda çoxelektrodlu sistemlərdə bircins elektrik və istilik sahələrinin paylanması və onların vəziyyətlərinin qiymətləndirilməsi məsələləri aşağı temperaturlu kompozitli elektrik-qızdırıcılarının (ATKQ) elektrik və istilik parametrlərinin kompleks təyin olunma məsələsi həlli vacib olan məsələlərdəndir. Bu parametlərin seçiləməsi məsələsinin dəqiq həlli isə yalnız elektrik sahəsinin bu və ya digər paylanması təmin edə biləcək elektrodlar sistemin elektrik sahə potensialının və mühitin xüsusi keçiriciliyin analitik hesablanması, materialların seçiləməsi və hazırlanması yolu ilə mümkündür. Analitik həllin üstünlüyü ondadır ki, bu üsul nəinki elektrik, səthdə sahənin potensialının paylanması funksiyasını (U), həmdə onun tərəmələrini təyin etməyə imkan verir.

Tədqiqatlar göstərir ki, Laplas tənliyinin analitik həlli hələlik yalnız müstəvi-paralel elektrik sahələrinin bəzi məsələləri üçün tətbiq olunmuşdur.

Bu baxımdan məqalə qızdırılan səthdə elektrik və istilik sahələrinin intensivliklərinin

təyinolunması üsulu ilə müstəvi çoxelektrodlu kompozitli qızdırıcı sistemlərin hal vəziyyətlərinin (səthdə elektrik və istilik sahələrinin paylanması funksiyalarını) qiymətləndirilməsinə həsr olunub.

NƏZƏRİ HİSSƏ

Çoxelektrodlu qızdırıcı sistemin sabit bircins elektrik və istilik sahələrində hal vəziyyətinin qiymətləndirilməsi dedikdə ATKQ-nın kompleks elektrik və istilik parametrlərinin araşdırılması ilə yanaşı qızdırıcının səthində potensial və temperaturun paylanmasıın kompleks araşdırılması nəzərdə tutulur.

Bu üsul baxılan səthdə elektrik sahəsinin intensivliyinin həmin səthdə yerləşən və baxılan sahənin hər hansı bir nöqtəsində dekart koordinat sisteminin oxlarının biri ilə əmələ gətirdiyi bucağın qiymətini xarakterizə edən bir köməkçi $\gamma(xy)$ funksiyasının əlavə edilməsinə əsaslanıb.

Bu $\gamma(xy)$ funksiyası harmonik olmaqla iki ölçülü Laplas tənliyinin və sahənin qüvvə xəttləri ilə ekvipotensial xəttlərinin ortoqonallıq şərtindən meydana çıxan və birinci növ sərhəd şərtlərini ödəyən funksiyadır:

$$U_s = \text{const} \quad \text{və} \quad \partial U / \partial n = 0. \quad (1)$$

Qeyd edək ki, köməkçi $\gamma(xy)$ funksiyanın hesablanması qarşıq sərhəd şərtləri daxilində potensialın hesablanmasından daha asandır. Bu funksiyanı təyin etdikdən sonra birbaşa sahənin kompleks intensivliyini, elektrostatik sahənin (və ya sahələrin) intensivliklərinin, E modulunu aşağıdakı münasibətlərdən tapmaq olar.

$$\begin{cases} \frac{\partial \gamma}{\partial x} = \frac{\partial(\ln |E|)}{\partial y} \\ \frac{\partial \gamma}{\partial y} = \frac{\partial(\ln |E|)}{\partial x} \end{cases} \quad (2)$$

[5,6]-dan məlum olduğu kimi müstəvi-paralel elektrik sahələrinin kompleks intensivliyi aşağıdakı düsturla hesablanır.

$$E = E_\zeta + jE_\eta = \frac{A \prod_{i=1}^m (\zeta - c_{oi})}{\prod_{k=1}^n \sqrt{(\zeta - a_k)(\zeta - a_k')}}, \quad (3)$$

harada ki, $\zeta - E$ -nin təyin olunduğu nöqtənin kompleks koordinatı; $a_k' - k$ lövhəsinin (elektrodunun) sərhədlərinin koordinatı; c_{oi} - sahənin intensivliyinin sıfıra bərabər, \vec{E} vektorunun isə istiqaməti naməlum olan hallar üçün, ikinci tərtib xüsusi nöqtənin kompleks koordinatıdır, A - sabit kəmiyyət, n - elektrodların sayı; $m = n = 2$ isə ikinci tərtib xüsusi nöqtələrin maksimal sayıdır.

Bu zaman $\eta = 0$ müstəvisində yerləşən və sonsuz uzunluğa malik yükənmiş və bir müstəvi üzərində yerləşən n sayda lövhələrin yaratdığı elektrostatik sahəsinin $E_{\eta=0}(\xi)$ və elektrik sahəsinin $E_{\eta=0}$ intensivliklərinin modulu

$$E_{\eta=0}(\xi) = E_{\eta=0}(\xi) = \frac{A \prod_{j=1}^m |\xi - c_{oj}|}{\prod_{k=1}^n \sqrt{|\xi - a_k| |\xi - a_k'|}} \quad (4)$$

düsturu ilə hesablanır. Burada A -sabiti, və naməlum c_{oi} koordinatların qiyməti sahə elektrostatik olan halda ümumi yükün miqdarı kimi və ya uyğun elektrodlara tətbiq olunan potensiallar fərqi kimi hesablanır. Bu zaman kompozitli elektrikqızdırıcısından keçən cərəyan şiddetinin qiyməti riyazi analoqdan istifadə etməklə [7,8]-də verilən tənliklərin köməyi ilə hesablanır.

$$I_{k,\ell} = \gamma \int_{a_k}^{a_{\ell}} E_{\eta=0}(\xi) d\xi \quad (5)$$

və

$$\Delta U_{k,k+1} = U_k - U_{k+1} = \int_{a_k}^{a_{k+1}} E_{\eta=0}(\xi) d\xi, \quad (6)$$

harada ki, $I_{k,\ell}$ - keçiriciliyə malik materialın vahid uzunluğundan keçən cərəyanın qiyməti, $\Delta U_{k,k+1}$ - k -ci və $k+1$ -ci elektrodlar arasındaki potensiallar fərqi, γ -kompozit materiallar xüsusi keçiriciliyidir.

Qeyd edək ki, çoxelektrodlu müstəvi-paralel sahələrin hesablanması üçün təklif olunan bu üsul ədədi hesablanması üsulundan daha məqsədə uyğundur. Doğrudan da, tor üsulundan istifadə edərkən birinci və ikinci tərtib xüsusi nöqtələrin nəzərə alınması bir sıra mürəkkəb hesablamalara gətirir.

(5) və (6) sərhəd şərtləri daxilində c_{oi} -ni təyin etdikdən sonra sistemin vahid uzunluğuna düşən elektrik keçiriciliyi üçün aşağıdakı ifadəni alarıq

$$G_{\alpha\ell} = \frac{I_{k\ell}}{\Delta U_{k_1 k+1}}. \quad (7)$$

Qeyd edək ki, sistemin vahid uzunluğuna düşən keçiriciliyini hesablayarkən A sabitini hesablamaq heç də zəruri deyil, çünki (7)-yə əsasən o hədd ixtisar olunur.

Bu üsul adətən n - koplanar sistemin gərginliyini təmin etmək üçün istifadə olunduğundan, baxılan sistemi də bir müstəvidə yerləşən n - elektrodlu sistemə çevirmək zəruridir. Bunun üçün daha effektli olan konform çevirmə üsulundan istifadə etmək daha məqsədə uyğundur. Bu üsulun əsasında konform çevrilmələrinə invariant olan nisbi keçiricilik durur. Başqa sözlə keçiriciliyin bir və ya bir neçə sahənin konform çevirmələrində cərəyanın qiyməti dəyişmir (bu halda, gələn məqalədə ətraflı danışılacaq).

Bələliklə çoxelektrodlu sistemlərin keçiriciliyinin hesablanması birinci mərhələsi real modeli müəyyən şərtlər daxilində ekvivalent hesablama modeli ilə əvəz etmək, ikinci mərhələsi hesablama modelini aşağı z müstəvisindən ζ yarımmüstəvisinə əksinin həndəsi köçürülməsi əməliyati, fiziki xarakter daşıyan üçüncü mərhələsi isə n - elektrodlu müstəvi-paralel elektrik sahəsinin intensivliyinin modulunu $E_{\alpha\eta}$ (4) düsturunun köməyi ilə təyin olunma mərhələsidir. Bu zaman ikinci tərtib xüsusi m nöqtələrinin naməlum c_{oi} koordinatlarının (5) və (6) ifadələri əsasında müəyyən sərhəd şərtlərinin (uyğun elektrodlar arasındaki potensiallar fərqiñin sıfır bərabər olması şərti) köməyi ilə tapmaq olar.

TƏCRÜBİ HİSSƏ

Konkret parametrlərə malik çoxelektrodlu sistemlərin (təqribən bircins mühitdə) elektrik

keçiriciliyini əyani hesablamaq üçün Şək.1-də verilən konkret sərhəd şərtlərinə malik sistem seçilmişdir. Bu sistem əsasında hesablama modeli elə seçilmişdir ki, sistemə qoyulan tələblər onun parametrlərini lazımlı hesablamaya imkan verir. Bunun üçün modelə qoyulan əsas tələblərdən biri elektrikqızdırıcılarında sahənin formalaşması faktorunun ciddiliyini təmin etməkdir. İkincisi, $f=50\text{Hz}$ tezlikli periodik dəyişən proseslər bu modeldə kvazistasionar proses kimi o vaxt qəbul edilə bilər ki, qızdırıcının ölçüləri elektromaqnit dalğalarının dalğa uzunluğundan kiçik olsun ($2l < < \lambda$). Burada $2l < < l_m$ (harada ki, l - qızdırıcının maksimal ölçüsü, λ - 50 Hz elektromaqnit dalğasının uzunluğu). Onda

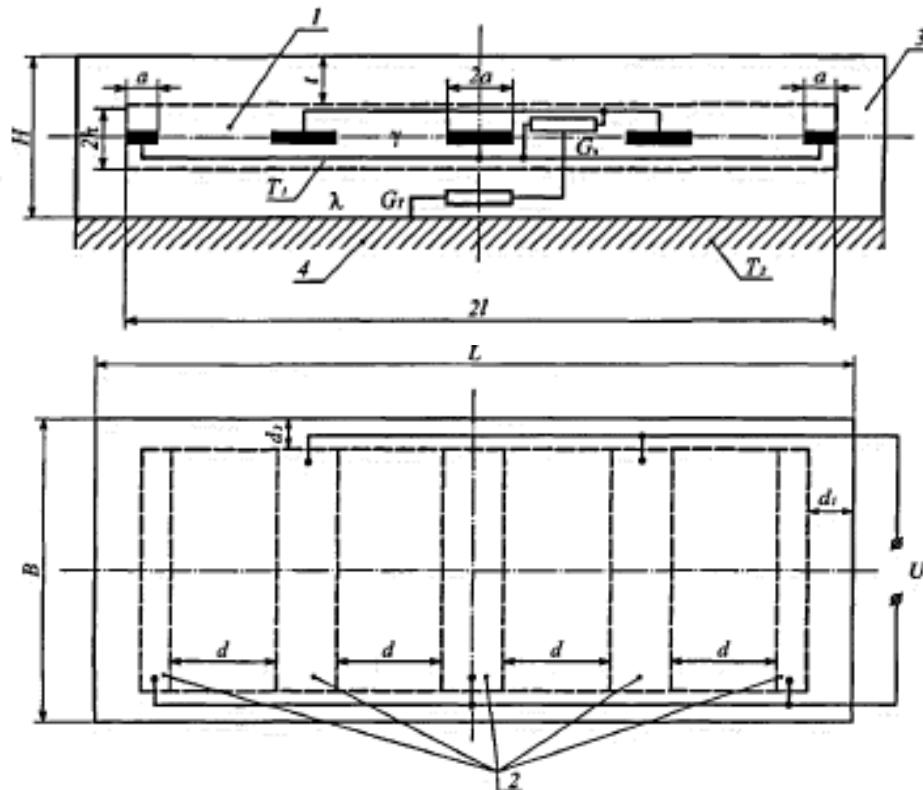
$$\lambda' = 3 \cdot 10^8 / 50 = 6 \cdot 10^6 \text{ m}.$$

Sahənin kvazistasionarlığı özünü doğrultduğu üçün ATKQ-ni mərkəzləşmiş parametrlə sistem kimi qəbul etmək olar. Elektrikqızdırıcı işləyən zaman elektrik cərəyanı, keçiriciliyi çox olan metal elektroddan rezistiv materiallara keçir. Əgər elektrodlar γ_{Cu} elektrik keçiriciliyi böyük olan misdən (Cu), kompozit material γ_{Km} isə texniki karbondan (Π -234) hazırlanmışdırsa, onların elektrik keçiriciklərinin nisbəti

$$58 \cdot 10^6 \text{ sm/m} : 27 \cdot 10^2 \text{ sm/m} = 2 \cdot 10^8 \gg 1 \text{ olar.}$$

Bu zaman mis elektrodlarda gərginlik düşgüsnü nəzərə almamaq olar ($U=\text{const}$). Başqa sözlə mis elektrodların daxilində elektrik sahəsini ekvipotensial qəbul etmək olar.

Qeyd edək ki, ATKQ-nin uzunluğu rezistiv materialların həndəsi ölçüləri tərtibində, eni ondan çox-çox kiçik, qalınlığı isə sonsuz kiçik olduğu üçün (həm də rezistiv materiallar, bircins olduğundan) elektrik qızdırıcılarındakı elektrik sahəsini müstəvi-paralel, perimetr boyu rezistiv materialın sahəsini isə elektrik sahə qüvvə xətləri üçün qeyri-şəffaf qəbul etmək olar [9]. Digər tərəfdən kompozit elektrik qızdırıcılarında istifadə olunan kompozit materialın (dielektrik nüfuzluğu $\epsilon \leq 3,5$ -dir) tutum müqaviməti, ona paralel qoşulmuş aktiv müqavimətdən bir neçə tərtib çox olduğu üçün aktiv müqaviməti nəzərə almamaq olar. Bələliklə qəbul olunan şərtlər seçilmiş hesablama modelinin əsasını təşkil etməklə bu modeli şəkildə verilmiş qızdırıcının hesablanması üçün işlək olmasına zəmanət verir.



Şəkil

Dördelektrodu müstəvi elektrik qızdırıcısının sxemi:

1-Rezistivli material, 2- elektrodlar, 3-izolyaedici qat, 4- istilik şüalandırıcı səth.

NƏTİCƏ

- Qəbul edilən hesablama modelini həm elektrodlararası məsafənin kiçik olan elektrikqızdırıcıları, həm də kifayət qədər bircinsliliyi olan keçirici mühitdə yerləşən qurğular üçün doğrudur.

- Yuxarıda qəbul edilən fərziyyələr təcrübədə müəyyən yaxınlaşmalarla yerinə yetirilir ki, bunların qəbul olunma ehtimalının nəzəri cəhətdən hesablanması bir sıra çətinliklərlə üzləşdiyindən təcrubi yolla yaxınlaşma daha məqsədə uyğundur.

- И.Ф.Кудрявцев, В.А.Керасенко. Электрический нагрев и электротехнология. М., Колос, (1975) 384.
- В.Н.Росстричин. Основы электрификации тепловых процессов в сельскохозяйственном производстве. М. Агропромиздат, (1988) 255.
- С.А.Ростимешкин. Обоснование параметров локальных электрообогревателей для молодняка сельскохозяйственных животных, Автореферат диссертации док.тех.наук ВИ-ЭСХ, (1996).
- Т.М.Халина. Определение распределения потенциала по поверхности низкотемпературного композиционного электрооборудования

с копланарными электродами, Изв. ВУЗов. строительство, №6 (1999) 86.

- А.Я.Сочиев. Расчет напряженности поля прямым методом, Энергоатомиздат, (1986) 136.
- М.Г.Струнский, М.М.Горбов. Расчет электрических емкостей в системе трех замкнутых оболочек прямоугольного сечения, Изв. РАН Энергетика, №1, (1994) 82.
- Л.Р.Нейман, Н.В.Коровкин. В.Л.Чечурин. Теоретические основы электроэнергетики, СПБ Питер, 3 (2004) 377.
- В.В.Евстигнеев, Г.А.Пугачев, Т.М.Халина. Расчет и проектирование низкотемператур-

- ных композиционных электрообогревателей, Новосибирск, Наука, (2001) 168.
9. Т.М.Халина. Расчет электрической проводимости между системами электродов в композиционном электронагревателе, Электротехничество, №10, (2003) 53.

MODEL FOR CALCULATING THE ELECTRIC AND CONTRUCTIONAL PARAMETERS OF MULTI-ELECTRODE COMPOSITE ELECTRIC RADIATORS

S.A.HUSEYNOVA, T.M.KHALINA

Comprehensive state of the electric and thermal parameters of low temperature composite electroheaters has been theoretically appreciated. It has been shown that it has been necessary to introduce an auxiliary function in the two-dimensional Laplace equation for a successful solution of this problem. This function satisfied the two-dimensional Laplace equation. Also expresses value of the angle boundary conditions of the first kind, which has formed by the vector of tension plane-parallel to the field with one of the axes of a Cartesian coordinate system and has been harmonic.

Investigation of electrical properties has been shown that $TlYbSe_2$ had p-type conductivity. The band gap of $TlYbSe_2$, as well as the mechanism of carrier scattering in it has been determined. Measurements of the magnetic characteristics have shown that the compound $TlYbSe_2$ had a paramagnetic state.

МОДЕЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И КОНСТРУКЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ МНОГО-ЭЛЕКТРОДНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ ЭЛЕКТРООБОГРЕВАТЕЛЕЙ

C.А.ГУСЕЙНОВА, Т.М.ХАЛИНА

В работе теоретически оценено комплексное состояние электрических и тепловых параметров низкотемпературных композиционных электронагревателей. Показано, что для успешного решения этой задачи необходимо в двухмерное уравнение Лапласа ввести вспомогательную функцию. Эта функция, удовлетворяющая двухмерному уравнению Лапласа и граничным условиям первого рода, выражает величину угла, образуемого вектором напряженности плоско-параллельного поля с одной из осей декартовой системы координат и является гармонической.

Редактор: д.н.по физике К.Нуриев

УДК 621.315.592

ЭЛЕКТРОННАЯ РЕЛАКСАЦИЯ, ВЫЗЫВАЕМАЯ ФОНОНАМИ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ КВАНТОВОМ ДИСКЕ

Г.Б.ИБРАГИМОВ, Р.Г.АБАСЗАДЕ

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр. Г. Джавида, 131
guseyn_gb@mail.ru

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

Ключевые слова: квантовый диск, электронно-фононное взаимодействие, электронная релаксация

РЕФЕРАТ

Изучена электронная релаксация в квантовом диске. Рассмотрено электронно-фононное взаимодействие для акустических фононов посредством деформационного потенциала и полярно - оптических фононов.

ВВЕДЕНИЕ

В течение последних трех десятилетий возник большой интерес к исследованию низко-размерных микроструктур, таких как квантовые ямы (КЯ), проволоки квантовых ям (ПКЯ), квантовые точки (КТ), квантовые диски, квантовые кольца и нанотрубки, т. к. эти микроструктуры позволяют открывать новые физические явления и имеют потенциальное технологическое применение. Теоретические исследования низкоразмерных полупроводниковых приборов открыли новое измерение в области изученияnanoструктур, которое было усилено экспериментаторами после успехов в микроэлектронике, точнее методов выращивания структур [1]. Ограничение движения электрона возможно путем понижения размерности таким образом, что оно становится соизмеримым с длиной волны де Броиля и приводит к значительным изменениям как в микроскопических, так и макроскопических свойствах структур из-за квантования энергетических уровней. Это может быть эффективно использовано в новых электронных [2] и фотонных устройствах [3]. Квантовая точка является одной из совершенных разработанных nanoструктур, которая открывает двери для создания квантового компьютера [4]; в последнее десятилетие различные геометрические вариации квантовых точек были предло-

жены исследователями [5-6]. Большой интерес вызывают кольцевые структуры для теоретических [7-8] и экспериментальных исследований [9].

Быстрый прогресс в области выращивания кристаллов и технологий микрофабрикаций позволяет исследовать проблему туннелирования в полупроводниковых структурах нанометрового диапазона; квантовомеханическая волновая природа электронов в подобных структурах используется для создания новых полупроводниковых структур. Ряд исследований по резонансному туннелированию приведен в [10-12]. Быстрый прогресс в технологиях микрофабрикаций естественным образом привел к идеи туннелирования через трехмерно ограниченные структуры квантовых точек [13-15]. Вследствие того, что электроны ограничены поперечно и вертикально в этих структурах, они становятся предметом большого интереса как с точки зрения физики явлений переноса, так и изготовления устройств с высоко интегрированным функциональным резонансным туннелированием. Созданы структуры самосборных дисков [16-17], были вычислены электронные уровни в приближении эффективной массы и адиабатическом приближении. Feng Chi и др.[18] исследовали влияние поперечных подзон, вызванных квантованным движением в плоско-

сти дисков, на плотность тока во всей структуре.

Теоретически большинство работ по КТ фокусируется на сферических КТ и только несколько работ по прямоугольным и цилиндрическим КТ или по квантовым дискам. Фактически, в то время как микрокристаллы приблизительно сферические, КТ лучше описываются тонким диском [19] или цилиндрами [20,21]. В теоретическом исследовании квантовых структур в форме диска Kayanuma [22] изучал возбуждение Wannier для бесконечных потенциальных барьеров, используя вариационный метод. Le Golf и Stebe [23] исследовали эту же проблему для цилиндрических КТ с конечным потенциалом. Guy Lamouche и Lepine [24] получили основное состояние электрона или дырки, ограниченной в квантовом диске, методом эффективного индекса. Peeters и Schweifer [25] изучали энергетические уровни двух электронных квантовых дисков с конечным потенциалом в магнитном поле. Chuan-Yu Chen и др. [26] исследовали влияние собственных волновых функций и собственных энергий и полярного эффекта на энергетические уровни в квантовом диске, используя теорию возмущения.

Из-за отличия многих свойств низкоразмерных полупроводников от массивных образцов, их исследование привлекло большое внимание в последние годы. В частности, имеется много работ, посвященных электронно-фононному взаимодействию в КЯ [27,28] в ПКЯ [29–31] и в КТ [32,33].

В этой статье мы теоретически изучаем взаимодействие между электронами и фононами в квантовом диске.

ФОРМАЛИЗМ

Рассмотрим квантовый диск толщины $2d$ и радиуса R . В цилиндрических координатах (ρ, ϕ, z) пусть диск занимает пространство $|z| \leq d$ и $\rho \leq R$, в то время как в пространстве $|z| > d$ и $\rho > R$ -вакуум. В рамках аппроксимации эффективной массы Гамильтониан для одиночной задачи имеет вид

$$H_e = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2, & |z| \leq d \text{ и } \rho < d \\ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V_0, & \text{в противном случае} \end{cases}$$

где m^* - эффективной массы электрона и m_0 - масса покоя свободного электрона, V_0 - высота потенциального барьера на поверхности и для приближения на бесконечности $V_0 \rightarrow \infty$.

В крайнем квантовом пределе волновые функции основных состояний для электрона, ограниченного в квантовом диске, задаются известными выражениями [26]

$$\Psi_{n0} = \sqrt{\frac{2}{V}} \frac{1}{J_1(x_{0t})} J_0\left(\frac{x_{0t}}{R}\rho\right) \sin \frac{(z+d)n\pi}{2d}$$

$$E_{n,t,0} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{x_{0t}}{R} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{2d} \right)^2 \right].$$

Предполагая, что x_{0t} есть t -ый нуль бесселевой функции нулевого порядка $J_0(x)$, для гамильтониана электронно-продольно-оптического (ПО) фононного взаимодействия имеем [34]

$$H_{LO} = \left[\frac{4\pi e^2}{V} \hbar \omega_{LO} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \cdot \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \rho} \left(\sum_{m=1,3,\dots} \frac{\cos(m\pi/2d)z}{[k^2 + (m\pi/2d)^2]^{\frac{1}{2}}} a_{k,m}^+ + \sum_{m=2,4,\dots} \frac{\sin(m\pi/2d)z}{[k^2 + (m\pi/2d)^2]^{\frac{1}{2}}} a_{k,m}^- \right) + H.C.$$

где $a_{k,m}^+$ ($a_{k,m}^-$) порождают (уничтожают) ограниченный ПО фонон с частотой ω_{LO} и волновым вектором $K = (k, m\pi/2d)$, нижние индексы m означают фононные моды по отношению к z -ой компоненте волнового вектора K , k - компонента волнового вектора K в плоскости $X - Y$.

Электрон взаимодействует с модами продольного акустического (ПА) фонона посредством деформационного потенциала и

может рассматриваться как звуковая волна для длинных волн и соответствующее фононное поле может быть записано как [35]

$$H(r,t) = i \sqrt{\frac{\hbar q}{2\rho v_s}} E_{ac} (e^{(iqr-\omega t)} - h.c.),$$

где E_{ac} - деформационный потенциал и v_s - скорость звука.

Время электронного рассеяния между начальным состоянием $\Psi_i(r)$ и конечным состоянием $\Psi_f(r)$ из-за фононной эмиссии может быть вычислено по золотому правилу Ферми,

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n,k} |\langle \Psi_i(r) | H | \Psi_f(r) \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_q).$$

где E_f и E_i соответствуют начальным и конечным электронным уровням, и $\hbar\omega_q$ - энергия фонона.

Элементы квадратной матрицы электронно-ПО фононного взаимодействия имеют вид:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_i(r) | H | \Psi_f \rangle^2 &= \left[\frac{256\pi n^2 e^2 \hbar \omega_{LO}}{V^3} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \right] \frac{1}{J_1^2(x_{0t}) J_1^2(x_{0t'})} \cdot \\ &\cdot \left| \int_0^R J_0(k\rho) J_0\left(\frac{x_{0t}}{R}\rho\right) J_0\left(\frac{x_{0t'}}{R}\rho\right) \rho d\rho \right| \end{aligned}$$

Множитель электронно-ПА фононного взаимодействия, возникающий вследствие перекрытия электронных и фононных волновых функций, задается в виде

$$I_{n,l,0;n't'0} = \int_0^R |\Psi_i(r)|^2 |\Psi_f|^2 r dr,$$

который зависит только от начальных/конечных электронных состояний. По этому уравнению может быть вычислена электронная подвижность, ограниченная фононами.

1. D.Granados, J.M.Garcia. *In(Ga)As Self-Assembled Quantum Ring Formation by Molecular Beam Epitaxy*, *Appl. Phys. Lett.*, **82** (2003) 2401-2403.
2. L.Zhuang, L.Guo, S.Y.Chou. *Silicon Single-Electron Quantum-Dot Transistor Switch Operating at Room Temperature*, *Appl. Phys. Lett.*, **72** (1998) 1205-1207.
3. M.Kunz et. al. *High-Speed Quantum Dot Lasers and Amplifiers for Optical Data Communication*, *Appl. Phys. A.*, **80** (2005) 1179-1182.
4. D.Loss, D.P.DiVincenzo. *Quantum Computation with Quantum Dots*, *Phys. Rev. A.*, **57** (1998) 120-126.
5. Y.Li, O.Voskoboynikov, C.P.Lee, S.M.Sze. *Electron Energy State Dependence on the Shape and size of semiconductor Quantum Dots*, *Jour. App. Phys.*, **90** (2001) 6416-6420.
6. Y.Li, O.Voskoboynikov, C.P.Lee, S.M.Sze. *Computer Simulation of Electron energy Levels for different Shape InAs/GaAs Semiconductor Quantum Dots*, *Comp. Phys. Comm.*, **141** (2001) 66-72.
7. T.V.Bandos, A.Cantarero, A.Garcia-Cristobal. *Finite Size Effects on the Optical Transitions in Quantum Rings under a Magnetic Field*, *The European Physical Journal B*, **53** (2006) 99-108.
8. S.Bhattacharyya, S.Sen, N.R.Das. *Tuning of Intersubband Transition in a Quantum Ring by External Electric Field*, *Proc. of the XIVth Int.Workshop on Physics of Semiconductor Devices (IWPSD-07), India*, (2007).
9. A.Lorke et. al. *Spectroscopy of Nanoscopic Semiconductor Rings*, *Phys Rev. Lett.*, **84** (2000) 2223-2226.
10. G.W.Bryant. *Electrons in coupled vertical quantum dots: Interdot tunneling and Coulomb correlation*, *Phys.Rev. B*, **48** (1993) 8024-8034.
11. X.-H. Wang, B.-Y.Gu, G.-Z.Yang. *Coupling between the transverse and longitudinal components of an electron in resonant tunneling*, *Phys.Rev. B*, **55** (1997) 9340-9343.
12. S.S.Allen, S.L.Richardson. *Theoretical investigations of resonant tunneling in asymmetric multibarrier semiconductor heterostructures in an applied constant electric field*, *Phys. Rev. B*, **50** (1994) 11693-11700.
13. Y.S.Joe, D.S.Ikeler, R.M.Cosby. *Characteristics of transmission resonance in a quantum-dot superlattice*, *J. Appl. Phys.*, **88** (2000) 2704-2708.
14. Y.Suda, H.Koyama. *Electron resonant tunneling with a high peak-to-valley ratio at room temperature in Si_{1-x}Ge_x/Si triple barrier diodes*, *Appl. Phys. Lett.*, **79** (2001) 2273-2275.
15. T.Bryllert et.al. *Transport through an isolated artificial molecule formed from stacked self-assembled quantum dots*, *Appl. Phys. Lett.*, **82** (2003) 2655-2657.

16. M.Korkusinski, P.Hawrylak. *Electronic structure of vertically stacked self-assembled quantum disks*, Phys. Rev. B, **63** (2001) 195311.
17. J.-L.Lui et.al. *Electronic structure of coupled vertically stacked self-assembled InAs quantum disks in a vertical electric field*, Superlatt. Microstruct., **33** (2003) 29-40.
18. Feng Chi, Jing-Lin Xiao, Shu-Shen Li. *Electronic transport through self-assembled quantum disks*, Superlatt. Microstruct., **35** (2004) 59-65.
19. K.Kash, A.Scherer, J.M.Worlock, H.G.Graighead, M.C.Tamargo. *Optical spectroscopy of ultrasmall structures etched from quantum wells*, Appl. Phys. Lett., **49** (1986) 1043-1045.
20. Reed, J.N.Randall, R.J.Agarwal, R.J.Matyi, T.M.Moore, A.E.Wetsel. *Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure*, Phys. Rev. Lett., **60** (1988) 535-537.
21. H.E.G.Arnot, M.Watt, C.M.Sotomayor-Torres, R.Giew, R.Cusco, J.Bates, S.P.Beaumout. *Photoluminescence of overgrown GaAs-GaAlAs quantum dots*, Superlatt. Microstruct., **5** (1989) 459-463.
22. Y.Kayanuma. *Wannier exciton in microcrystals*, Solid State Commun., **59** (1986) 405-408.
23. S.Le Goff, B.Stebe. *Influence of longitudinal and lateral confinements on excitons in cylindrical quantum dots of semiconductors*, Phys. Rev. B, **47** (1993) 1383-1391.
24. Guy Lamouche, Yves Lepine. *Ground state of a quantum disk by the effective-index method*, Phys. Rev. B, **51** (1995) 1950-1953.
25. F.M.Peeters, V.A.Schweigert. *Two-electron quantum disks*, Phys. Rev. B, **53** (1996) 1468-1474.
26. Chuan-Yu Chen, Wai-Sang IL, Xiao-Ying Teng, Shi-Dong Liang. *Polaron in a quantum disk*, Physica B: Condensed Matter., **245** (1998) 92-102.
27. S.L.Ban, J.E.Hasbun. *Bound polaron in a polar semiconductor heterojunction* Phys. Rev. B, **59** (1999) 2276.
28. G.B.Ibragimov. *Free-carrier magnetoabsorption in quantum well structures*, Ukr. J. Phys., **48** (2003) 527-532.
29. M.Bouhassoune, R Charrour, M.Fliyou, D.Bria, A.Nougaoui. *Free-carrier magnetoabsorption in quantum well structures*, Physica B, **304** (2001) 389-397.
30. G.B.Ibragimov. *Free-carrier magnetoabsorption in quantum well wires*, J. Phys. Condens. Matter., **15** (2003) 8949-8956.
31. G.B.Ibragimov. *Confined LO phonon limited free-carrier absorption in quantum well wires*, Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics, **9** (2007) 12-16.
32. Li Zhang, Hong-Jing Xie, Chuan-Yu Chen, *A Bound Polaron in a Spherical Quantum Dot with a Finite Confining Potential*, Chinese J. Phys., **41** (2003) 148.
33. You-Bin Yu, Kang-Xian Guo, *Exciton effects on nonlinear electro-optic effects in semi-parabolic quantum wires*, Physica E, **18** (2003) 492.
34. J.J.Licari, R.Evard. *Electron-phonon interaction in a dielectric slab: Effect of the electronic polarizability*, Phys. Rev. B, **15** (1977) 2254-2264.
35. J.H.Davis. *The Physics of Low -Dimensional semiconductors* (Cambridge University Press, 1997) 303.

PHONON-INDUCED ELECTRON RELAXATION IN A SEMICONDUCTOR QUANTUM DISK.

G.B.IBRAGIMOV, R.G.ABASZADE

The electron-phonon interaction for acoustic phonons taking into accounts deformation potential and polar-optical phonons has been considered.

YARIMKEÇİRİCİ KVANT DİSKDƏ FONONLAR VASİTƏSİLƏ ELEKTRONLARIN RELAKSASIYASI

H.B.İBRAHİMOV, R.Q.ABASZADƏ

Deformasiya potensialı və polyar optik fononlar nəzərə alınaraq akustik fononlar üçün elektron-fonon qəşiliqli təsirə baxılmamışdır.

Редактор: акад. М.Алиев

UOT 535-46

SPEKTROSKOPİK ELLİPSOMETRİYA ÖLÇMƏLƏRİNİN TƏDQİQİNDƏ "GRAPHİCAL ANALYSİS" PROQRAMIN TƏTBİQİNİN ÜSTÜNLÜKLƏRİ

O.R.ƏHMƏDOV*, M.H.HÜSEYNƏLİYEV*, N.M.ABDULLAYEV**,
X.N. XƏLİLOVA**, N.A.QASIMOV**

AMEA Naxçıvan Böləməsi*

AZ 7700, H. Əliyev prospekti 35

Azərbaycan MEA-nın Fizika İnstitutu**

AZ 1143, Bakı şəh., H. Javid pr., 131

orucahmedov@mail.ru, mamedhuss@mail.ru,

nadirabdulla@mail.ru, ngasimov@physics.ab.az, khalilova@physics.ab.az

Daxil olub: 18.05.2015

Çapa verilib: 22.06.2015

REFERAT

İşdə spektroskopik ellipsometriya ölçmələrinin tədqiqində "Graphical analysis" proqramının tətbiqinin üstünlüklerindən bəhs olunur. Bu proqram vasitəsilə koordinatlarla verilmiş eksperimental asılılığı qurmaq, bu asılılığın birinci, ikinci tərtib törəmələrini çox asanlıqla almaq mümkündür və nəhayət həmin əyrinin və yaxud onun müəyyən oblastının fittingini aparmaq mümkündür. Nəticədə bu funksiyalara daxil olan sabitlər təyin olunur. PbS nazik təbəqəsinin timsalında bu məsələlərə aydınlıq gətirilir.

Açar çözərlər: PbS, nazik təbəqə, "Graphical analysis", fitting, kritik nöqtə, kompleks dielektrik funksiyası, ikinci tərtib törəmə.

Yarımkeçiricilər fizikasında yarımkəçirici-nin kritik nöqtələrinin təyini əsas məsələdir. Spektroskopik ellipsometriya ölçmələri bu nöqtələri təyin etməyə imkan verən tədqiqat üsullarından biridir. Bu ölçmələrin nəticələri analiz olunarkən eksperimental əyrilərin nəzəri funksiyalara fittinginin aparılması əsas məsələlərdən biridir. Bir çox müəlliflər fitting prosesini yerinə yetirərkən çox mürrəkkəb hesablamalardan [1], Savitski-Golay alqoritmlarından [2], SA alqoritmlarından və s. istifadə etmişlər.

Halbuki bu məqsəd üçün "Graphical analysis" proqramından istifadə etmək çox münasibdir, ona görə kə, əvvəla bu proqramla koordinatlarla verilmiş eksperimental əyri qurmaq mümkündür. Bu asılılığın birinci, ikinci tərtib törəmələrini çox asanlıqla almaq mümkündür və nəhayət həmin əyrinin və yaxud onun müəyyən oblastının fittingini aparmaq (yəni həmin əyri ilə maksimum üst-üstə düşə bilən nəzəri asılıqları müəyyən etmək) mümkündür. Konkret olaraq spektroskopik ellipsometriya məsələlərinin həlli zamanı ekspe-

rimental kompleks dielektrik funksiyası $\varepsilon(\omega)$ -nın ikinci tərtib törəmələrinin həqiqi və xəyalı hissələri üçün aldığımız asılılıqların fittingi belə məsələlərin həllində istifadə olunan nəzəri funksiyaların vasitəsilə aparılır. Nəticədə bu funksiyalara daxil olan sabitlər təyin olunur. Bu sabitlərdən biri də E -kritik nöqtəsidir ki, bu da yarımkəçiricilər nəzəriyyəsi üçün çox mühüm kəmiyyətdir.

ANALİZİN METODOLOGİYASI VƏ ƏSAS İFADƏLƏR

Bu metodun əsasında kompleks dielektrik funksiyasının ikinci tərtib törəməsinin standart analitik funksiyalarla fittingi durur. Kompleks dielektrik funksiyası üçün analitik ifadə $m \neq 0$ hali üçün aşağıdakı şəkildədir:

$$\varepsilon(\omega) = C - Ae^{i\theta}(\omega - E + i\Gamma)^m \quad (1)$$

burada A -amplituda, E -kritik nöqtə, Γ - genişlənmə, θ -sə eksiton faza bucağıdır.

İfadəyə daxil olan m kəmiyyəti dörd müxtəlif qiymət ala bilər: $m = \frac{1}{2}$ kritik nöqtənin üçölçülü (3D) halına aiddir; $m = 0$ kritik nöqtənin ikiölçülü (2D) halına aiddir; $m = -\frac{1}{2}$ kritik nöqtənin birölçülü (1D) halına aiddir; $m = -1$ isə eksiton tip kritik nöqtədir [4]. $m = 0$ hali üçün (1) ifadəsi aşağıdakı kimi olur

$$\varepsilon(\omega) = C - Ae^{i\theta} \ln(\omega - E + i\Gamma). \quad (2)$$

Lakin (1) və (2) funksiyalarına daxil olan parametrləri təyin etmək üçün (eləcə də C parametrini aradan qaldırmaq üçün) $\varepsilon(\omega)$ dielektrik funksiyasının eksperimental qiymətlərinin ikinci tərtib diferensiallanmasıdan alınan $\frac{d^2\varepsilon}{d\omega^2}$ funksiyasından istifadə etmək lazımdır.

Bu halda (1) və (2) funksiyalarının ikinci tərtib törəmələri $m \neq 0$ hali üçün

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega^2} = -m(m-1)Ae^{i\theta}(\omega - E + i\Gamma)^{m-2} \quad (3)$$

və ya triqonometrik formada yazsaq

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega^2} = A^1(\Omega)^{m-2/2} \cdot \left\{ \cos \left[(m-2)\arg \cos \left(\frac{\omega-E}{\Omega^{\frac{1}{2}}} \right) + \theta \right] + i \sin \left[(m-2)\arg \cos \left(\frac{\omega-E}{\Omega^{\frac{1}{2}}} \right) + \theta \right] \right\} \quad (4)$$

olacaqdır, burada $A^1 = -m(m-1)A$

və $\Omega = (\omega - E)^2 + \Gamma^2$. $m = 0$

hali üçün

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega^2} = Ae^{i\theta}(\omega - E + i\Gamma)^{-2} \quad (5)$$

və triqonometrik formada

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega^2} = \frac{A}{\Omega} \left\{ \cos \left[-2 \arg \cos \left(\frac{\omega-E}{\Omega^{\frac{1}{2}}} \right) + \theta \right] + i \sin \left[-2 \arg \cos \left(\frac{\omega-E}{\Omega^{\frac{1}{2}}} \right) + \theta \right] \right\} \quad (6)$$

Fitting apararkən triqonometrik formada yazılmış (4) ($m \neq 0$ olduqda) və ya (6) ($m = 0$ olduqda) funksiyasının həqiqi $d^2\varepsilon_1(\omega)/d\omega^2$ və xəyalı $d^2\varepsilon_2(\omega)/d\omega^2$ komponentləri istifadə olunur.

Başqa sözlə eksperimental alınan $\varepsilon_1(\omega)$ və $\varepsilon_2(\omega)$ -dən hesablanmış $d^2\varepsilon_1(\omega)/d\omega^2$ və $d^2\varepsilon_2(\omega)/d\omega^2$ əyriləri ilə uyğun olaraq (4) və ya (6) funksiyalarından alınan $d^2\varepsilon_1(\omega)/d\omega^2$ və $d^2\varepsilon_2(\omega)/d\omega^2$ əyriləri fittingə cəlb olunur və ən yaxşı fitting hali üçün A, E, Γ və θ -parametrləri təyin olunur. Qeyd etmək lazımdır ki, "Graphical analysis" programı bu sabitləri nəticə olaraq verir.

NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

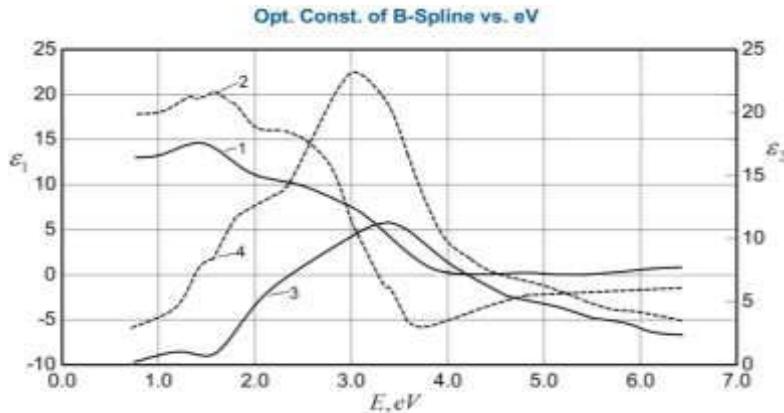
Bütün bu deyilənlərə tərəfimizdən alınan PbS nazik təbəqəsi üçün apardığımız ellipsometrik ölçmələrin misalında baxaq. Bu ölçmələr "J. A. WOOLLAM COMPANY – M 2000 ELLİPSOMETER" ellipsometrində yerinə yetirilmişdir.

Şəkil 1-də kompleks dielektrik funksiyası $\varepsilon(\omega)$ -nın həqiqi $\varepsilon_1(\omega)$ (1-əyrisi) və xəyalı $\varepsilon_2(\omega)$ (3-əyrisi) hissələrinin eksperimental spektrləri (bütöv xətlər) göstərilmişdir.

Bu əyriləri "Graphical analysis" programına köçürmək üçün ellipsometr cihazının hər bir əyri üçün verdiyi 700-dən çox nöqtənin koordinatından istifadə edilmişdir. Bu program vasitəsilə $\varepsilon_1(\omega)$ və $\varepsilon_2(\omega)$ əyriləri üzərində hər bir nöqtə üçün ikinci tərtib törəmə alınmış, $d^2\varepsilon_1(\omega)/d\omega^2$ və $d^2\varepsilon_2(\omega)/d\omega^2$ əyriləri qurulmuşdur (Şəkil 2).

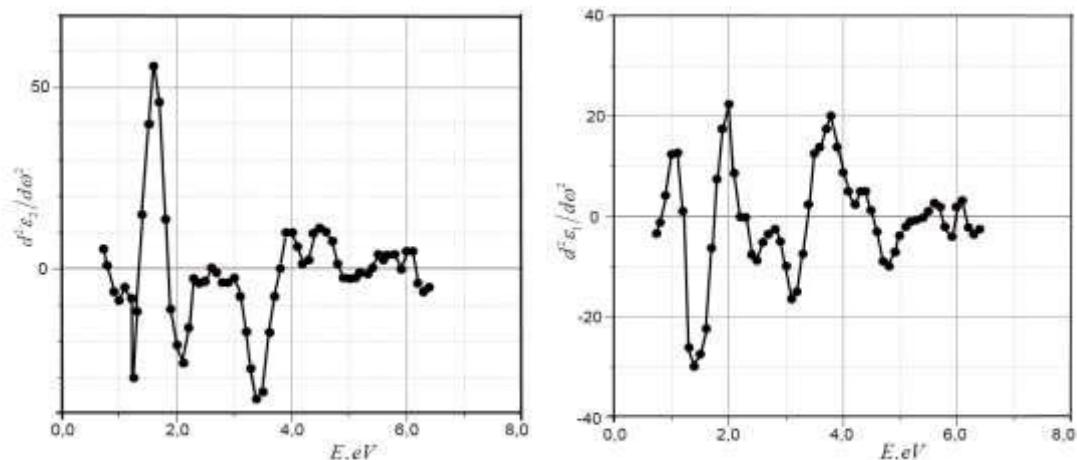
Hər iki əyri eyni olmaqla müəyyən oblastlara bölünmüş və fitting bu oblastlar üzrə yerinə yetirilmişdir.

Şəkil 3-də spektrin 2,3÷4,3 eV oblastı üçün eksperimental və "Graphical analysis" programı vasitəsilə müəyyən edilmiş $d^2\varepsilon_1(\omega)/d\omega^2$ və $d^2\varepsilon_2(\omega)/d\omega^2$ fitting əyriləri göstərilmişdir. Ən yaxşı fitting hali $m = 0$ qiyməti üçün alınmışdır. Nəticədə (6) ifadəsinə daxil olan parametrlər təyin olunmuşdur: A=5,30; E=3,53; Γ =0,420; θ =2,10.



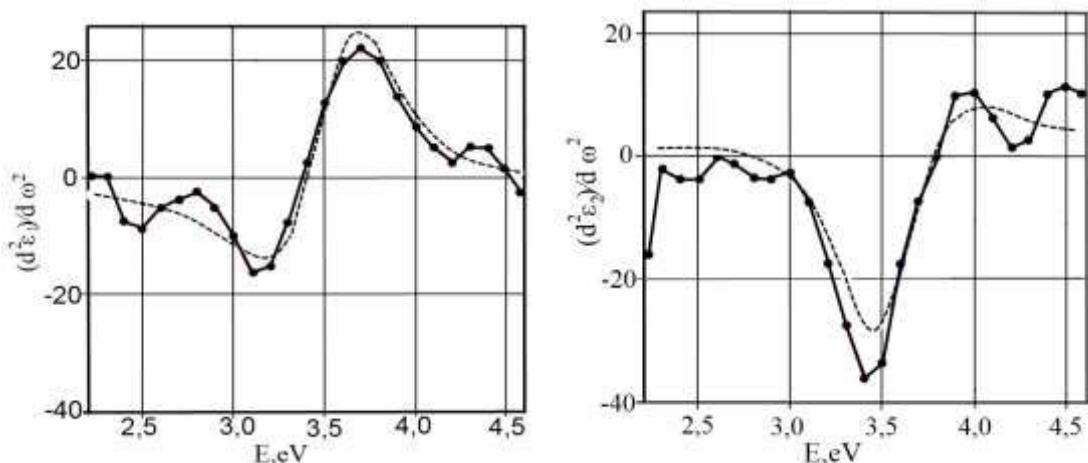
Şəkil 1.

PbS nazik təbəqəsinin otaq temperaturunda ölçülülmüş kompleks dielektrik funksiyasının (ε_1) -həqiqi (1-əyrisi) və (ε_2) -xəyali (3-əyrisi) hissələrinin və PbS standartına uyğun (ε_1) -həqiqi (2-əyrisi) və (ε_2) -xəyali (4-əyrisi) hissələrinin spektral asılılıqları.



Şəkil 2.

PbS nazik təbəqəsinin "Graphical analysis" programı əsasında qurulmuş $d^2\varepsilon_1(\omega)/d\omega^2$ -həqiqi və $d^2\varepsilon_2(\omega)/d\omega^2$ -xəyali hissələri.



Şəkil 3.

PbS nazik təbəqəsinin 2,3÷4,3eV enerji oblastı üçün $\varepsilon_1(\omega)$ və $\varepsilon_2(\omega)$ eksperimental əyrilərinin ikinci tərtib tərəmələri və uyğun nəzəri fitting əyriləri.

Eyni bir kompleks funksiyanın həqiqi və xəyali hissələri olduqları üçün müəyyən bir oblast daxilində təyin olunan bu parametrlər də eyni olmalıdır. Göstərdiyimiz bu misalda kritik nöqtə $E_1 = 3,53$ eV təyin edilmişdir.

1. J.G.Albornoz, R.Serna, M.Leon. Optical properties and electronic structure of polycrystalline $\text{Ag}_{1-x}\text{Cu}_x\text{InSe}_2$ alloys, *J. Appl. Phys.*, **97** (2005) 103515 (1-7).
2. S.G.Chi, H.Y.Zhao, C.Persson. Dielectric function spectra and critical point energies of $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ from 0,5 to 9,0eV, *J. Appl. Phys.*, **111** (2012) 33506 (1-6).
3. S.Levcenko, G.Gurieva, E.J.Friedrich. Optical constants of $\text{Cu}(\text{In}_{0,7}\text{Ga}_{0,3})_5\text{Se}_8$ and $\text{Cu}(\text{In}_{0,4}\text{Ga}_{0,6})_5\text{Se}_8$ crystals, *Materials Chemistry and Physics*, **71** (2010) 1443 (43-49).
4. P.Lautenschlager, M.Garriga, S.Logothetidis, M.Cardona. Interband critical points of GaAs and their temperature dependence, *Phys. Rev. B*, **35** (1987) 9174 (9174-9180).
5. J.J.Valenzuela-Jáuregui, R.Ramírez-Bon, A.Men doza-Galván. Optical properties of PbS thin films chemically deposited at different temperatures, *Thin Solid Films*, **441** (2003) (104-110).
6. D.E.Aspnes, M.Cardona. Electro-Optic Measurements of PbS, PbSe, and PbTe, *Phys. Rev.*, **173** (1968) 714-721.

ADVANTAGES TO USE THE "GRAPHİCAL ANALYSIS" PROGRAM İN DATA PROCESSİNG İN SPECTROSCOPY ELLİPSOMETRİC RESEARCH

O.R.AHMADOV, M.H.HUSEYNALİYEV, N.M.ABDULLAYEV, X.N.CHALİLOVA, N.A.GASIMOV

It has been discussed the benefits of using the "Graphical analysis" program in data processing in ellipsometric studies. With this software, you could plot the coordinates, it was very easy to obtain the first and second derivatives and hold the fitting of this dependence, or any part of this relationship. It has been possible to calculate function's constants. All of these issues have been clarified in the example of a thin film PbS.

ПРЕИМУЩЕСТВА ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРОГРАММЫ "GRAPHİCAL ANALYSIS" В ОБРАБОТКЕ ДАННЫХ В СПЕКТРОСКОПО-ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

О.Р.АХМЕДОВ, М.Г.ГУСЕЙНАЛИЕВ, Н.М.АБДУЛЛАЕВ, Х.Н.ХАЛИЛОВА, Н.А ГАСЫМОВ

В работе ведется дискуссия о преимуществах использования программы "Graphical analysis" в обработке данных в эллипсометрических исследованиях. С помощью этой программы можно построить зависимость по координатам, очень легко можно получить первую и вторую производные и провести фиттинг этой зависимости или какой-то части этой зависимости. В результате определяются постоянные входящие в функцию. Все эти вопросы поясняются на примере тонкой пленки PbS.

Редактор: проф. Г.Оруджев

УДК 539.143.43

ТЕОРИЯ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА НА ЯДРАХ ПАРАМАГНИТНЫХ ИОНОВ В ПОЛУМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

М.Н.АЛИЕВ

Бакинский Государственный Университет
AZ 1148, г. Баку, ул. З.Халилова, 23
mammadaliyev@hotmail.com

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

Исследована форма линии магнитного резонанса на ядрах парамагнитных ионов в полумагнитных полупроводниках методом функции Грина при произвольных температурах и малых концентрациях ионов. Найдены критерии наблюдаемости ядерного магнитного резонанса, вычислены ширина и сдвиг резонансной линии.

Ключевые слова: полумагнитные полупроводники, ядерный магнитный резонанс, аналитические функции Грина, теория возмущения.

Кристаллы с парамагнитными ионами как объект исследования и применения занимают важное место в физике твердого тела. Особый интерес представляет всестороннее теоретическое и экспериментальное изучение высокотемпературных сверхпроводников и полумагнитных полупроводников (ПМП), которые так же являются сложными соединениями содержащими парамагнитные ионы. Метод магнитного резонанса (МР) дает возможность использования парамагнитных ионов в данных соединениях как источник информации на атомном уровне [2], [3].

Настоящая работа посвящена развитию теории ядерного магнитного резонанса в ПМП. Известно, что форма линии резонансного магнитного поглощения $[f(\omega)]$, ее ширина (Δ) и сдвиг (δ) дают важную информацию об исследуемой системе на микроскопическом уровне. Методом двухвременных аналитических функций Грина ($\Phi\Gamma$) проведем вычисление этих важных характеристик $[f(\omega); \Delta; \delta]$ линии поглощения МР.

Согласно формализму МФГ, ФЛ ЯМР отыскивается как мнимая часть ядерной запаздывающей ФГ $\ll I_l^- | I_{l'}^+ \gg_{\omega}^R$:

$$f(\omega) = \text{Im} \ll I_l^- | I_{l'}^+ \gg_{\omega}^R, \quad (1)$$

здесь I^{\pm} - ядерные повышающие и понижающие спиновые операторы.

Для дальнейших вычислений $f(\omega)$ необходимо записать цепочку зацепляющихся уравнений для антикоммутаторной ФГ:

$$E \ll I_l^- | I_{l'}^+ \gg = - \ll I_l^- | I_{l'}^+ \gg + \ll [I_l^-, H] | I_{l'}^+ \gg. \quad (2)$$

Соотношение (2) показывает, что для составления цепочки уравнений необходимо иметь явный вид гамильтониана системы Н:

$$\begin{aligned} H &= H_{zc} + H_{zs} + H_{zN} + H_L + H_{sph} + H_{sI} + H_{\infty} \\ H &= H_0 + H_{\text{int}} ; \quad H_0 = H_{z\sigma} + H_{zs} + H_{zN}; \\ H_{\text{int}} &= H_{sph} + H_{sz} + H_{s\sigma}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $H_{z\sigma}, H_{zs}, H_{zN}, H_L, H_{sph} + H_{sI} + H_{\infty}$ являются гамильтонианами электронных, ионных, ядерных спинов, во внешнем магнитном поле, поля, фононов, спин- фононного, сверхтонкого и электрон – ионного спин-спинового взаимодействий соответственно.

$$\begin{aligned} H_{z\sigma} &= -\hbar\omega_e \sum_j \sigma^z(r_j), \\ H_{zs} &= -\hbar\omega_s \sum_j S_i^z, \quad H_z = -\hbar\omega_N \sum_i I_i^z, \end{aligned}$$

$$H_i = \sum_{q\alpha} \hbar \omega_{q\alpha} b_{q\alpha}^+ b_{q\alpha}^i, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} H_{sph} &= i \sum_{q\alpha} q \left(\frac{\hbar}{2 p \nu \omega_{q\alpha}} \right)^{1/2} (g_{\gamma\alpha}^z S_z + g_{\gamma\alpha}^- S^+ + g_{\gamma\alpha}^+ S^-) (b_{q\alpha} - b_{q\alpha}^+) \\ H_{sl} &= \frac{1}{2} \sum_i a S_i^z I_i^z \\ H_\infty &= - \sum_j J(R_j - r_j) \left[S_j^z \sigma^z(r_j) + \frac{1}{2} [S_j^- \sigma^+(r_j) + S_j^+ \sigma^-(r_j)] \right] \end{aligned}$$

здесь $\omega_e, \omega_s, \omega_N$ – ларморовы электронные, спиновые, ядерные частоты, $S^\pm, S^z, \sigma^\pm, \sigma^z$ – ионные и электронные спиновые операторы, $\omega_{q\alpha}$ – частота фононов с волновым вектором \vec{q} и поляризацией α , $b_{q\alpha}^+, b_{q\alpha}$ – операторы рождения и уничтожения фононов, а и J являются коэффициентами сверхтонкого ион – ядерного и электрон – ионного взаимодействия. Здесь предполагается, что $I = \frac{1}{2}$; $S = \frac{1}{2}$ магнитное поле $H \parallel z$, явный вид H_{sph} был получен Б.И.Когелаевым [4].

Используя (2), (3) и (4) получаем следующее уравнение:

$$(E - \omega_N) \ll I_l^- |I_{l'}^+ \gg = -\delta_{ll'} c + \frac{a}{\hbar} \ll S_l^z I_l^- |I_{l'}^+ \gg. \quad (5)$$

Из уравнения (5) видно, что начальная ФГ зацепилась за новую ФГ $\ll S_l^z I_l^- |I_{l'}^+ \gg$ более высокого порядка. Для корректного решения (5) нужно тонкое расщепление цепочки. Грубое расщепление (5) неизбежно приводит к потере важных эффектов. Уравнение (5) будем решать методом теории возмущения для ФГ [5] введением массового оператора. Записываем (5) в следующем виде:

$$[E - \omega_N - M(E)] \ll I_l^- |I_{l'}^+ \gg = -\delta_{ll'} \quad (6)$$

где $M(E)$ должен удовлетворять следующему уравнению:

$$M(E) \ll I_l^- |I_{l'}^+ \gg = \frac{a}{\hbar} \ll S_l^z I_l^- |I_{l'}^+ \gg. \quad (7)$$

Решение уравнения (5) свелось к вычислению массового оператора $M(E)$. Для вычисления $M(E)$ вторую ФГ $\ll S_l^z I_l^- |I_{l'}^+ \gg$ дифференцируя по второму временному аргументу t' находим:

$$\begin{aligned} -(E - \omega_N) \ll S_l^z I_l^- |I_{l'}^+ \gg &= \ll S_l^z \gg \delta_{ll'} - \\ -\frac{a}{\hbar} \ll S_l^z I_l^- |S_{l'}^z I_{l'}^+ \gg & \end{aligned} \quad (8)$$

Из уравнений (7) и (8) находим:

$$M(E) \ll I_l^+ \gg = \left[-(E - \omega_N) \right]^{-1} \times \left[\frac{a}{\hbar} \ll S_l^z \gg \delta_{ll'} - \frac{a^2}{\hbar^2} \ll S_l^z I_l^- |S_{l'}^z I_{l'}^+ \gg \right]. \quad (9)$$

Начальная ФГ зацепилась за третью ФГ $\ll S_l^z I_l^- |S_{l'}^z I_{l'}^+ \gg$. Записываем новую цепочку уравнения для этой ФГ:

$$\begin{aligned} -(E - \omega_N) \ll S_l^z I_l^- |S_{l'}^z I_{l'}^+ \gg &= \\ = -\frac{1}{4} \delta_{ll'} + P_{sph} \ll S_l^z I_l^- |S_{l'}^z I_{l'}^+ \gg + & \quad (10) \\ + P_{sl} \ll S_l^z I_l^- |S_{l'}^z I_{l'}^+ \gg + P_{\infty} \ll S_l^z I_l^- |S_{l'}^z I_{l'}^+ \gg & \end{aligned}$$

здесь введены поляризационные операторы $P_{sph}, P_{sl}, P_{\infty}$ которые обусловлены спин – фононным, сверхтонким и электрон – ионным спиновым взаимодействиями. Поляризационные операторы представляют самостоятельный интерес, и они могут быть вычислены отдельно в явном виде.

Записываем уравнение (10) в следующем виде:

$$\ll S_l^z I_l^+ \gg = \ll S_l^z I_l^- \gg = \frac{1}{4} \delta_{ll'} (E - \omega_N - P_{sph} - P_{sl} - P_{\infty})^{-1}. \quad (11)$$

Массовый оператор находим, используя (6), (9) и (11):

$$M(E) = \Delta + \frac{a^2}{4\hbar^2} (\omega_l - P)^{-1}, \quad (12)$$

здесь $\Delta = \frac{a}{\hbar} \ll S_l^z \gg$; $\omega_l = E - \omega_N - \Delta$;

$$P = P_{sl} + P_{sph} + P_{\infty} - \Delta.$$

Искомую ФГ получаем из (6) и (12)

$$G(E) = \langle\langle I^- | I^+ \rangle\rangle_E = (\omega_l - P) \left[\frac{a^2}{4\hbar^2} - \omega_l(\omega_l - P) \right]^{-1} \quad (13)$$

Имея в явном виде $G(E)$ не представляет больших затруднений используя известные соотношения найти запаздывающую ФГ и затем, выделив мнимую часть получить ФЛ ЯМР в ПМП на ядрах парамагнитных ионов:

$$f(\omega) = A^2 (\gamma_{sl} + \gamma_{sph} + \gamma_{\infty}) \left[(\omega_l^2 - A^2) + \omega_l^2 (\gamma_{sl} + \gamma_{sph} + \gamma_{\infty})^2 \right]^{-1} \quad (14)$$

где

$$A = \frac{a}{2\hbar}; \quad \gamma_{sl} = I_m P_{sl}; \quad \gamma_{sph} = I_m P_{sph}; \quad \gamma_{\infty} = I_m P_{\infty}$$

являются вероятностями перехода электронного спина парамагнитных ионов обусловленными сверхтонким, спин – фононным и электрон- ионным спин- спиновыми взаимодействиями соответственно.

В ПМП ФЛ ЯМР будет обусловлена флуктуацией локального магнитного поля создаваемого электронами парамагнитных ионов на ядрах. Флуктуации локального поля происходят из-за флуктуаций электронных переменных под воздействием имеющихся взаимодействий ($H_{sl}; H_{sph}; H_{\infty}$). Найденная нами ФЛ ЯМР (14) для общего случая произвольных флуктуаций локального поля оказалось достаточно сложной. Рассмотрим интересные для эксперимента частные случаи быстрых и медленных флуктуаций локального магнитного поля на резонирующих ядрах.

В случае быстрых флуктуаций ($\gamma_{sl} + \gamma_{sph} + \gamma_{\infty} \gg A$) (14) приобретает вид:

$$f(\omega) = \frac{A^2 (\gamma_{sl} + \gamma_{sph} + \gamma_{\infty})^{-1}}{\omega_l^2 + [A^2 (\gamma_{sl} + \gamma_{sph} + \gamma_{\infty})^{-1}]^2}. \quad (15)$$

В данном случае ФЛ ЯМР является Лоренцевой линией с полушириной:

$$\delta_1 = A^2 (\gamma_{sl} + \gamma_{sph} + \gamma_{\infty})^{-1}. \quad (16)$$

Формула (16) показывает, что $H_{sl}; H_{sph}; H_{\infty}$ вносят свой вклад в δ_1 . Критерием наблюдаемости ЯМР является условие:

$$A^2 (\gamma_{sl} + \gamma_{sph} + \gamma_{\infty})^{-1} \ll \omega_N. \quad (17)$$

Для достижения условия (17) необходимо увеличить ω_N , наращивая внешнее постоянное магнитное поле, что в настоящее время технически достижимо. При низких температурах $\gamma_{sph} \rightarrow 0$ и δ_1 имеет вид:

$$\delta_1 = A^2 (\gamma_{sl} + \gamma_{\infty})^{-1}. \quad (18)$$

Измерив полуширину ЯМР δ_1 при низких температурах и вычислив $\gamma_{sl}, \gamma_{\infty}$ возможно определить постоянную сверхтонкого взаимодействия из (18).

Для случая медленных флуктуаций локального поля ($\gamma_{sl} + \gamma_{sph} + \gamma_{\infty} \ll A$) $f(\omega)$ имеет вид:

$$f(\omega) = \frac{1}{2} (\gamma_{sl} + \gamma_{sph} + \gamma_{\infty}) \times \left[(\omega_l - A)^2 + \left(\frac{1}{2} (\gamma_{sl} + \gamma_{sph} + \gamma_{\infty}) \right)^2 \right]^{-1}. \quad (19)$$

Резонансная линия поглощения является Лоренцевой с полушириной δ_2 :

$$\delta_2 = \frac{1}{2} (\gamma_{sl} + \gamma_{sph} + \gamma_{\infty}). \quad (20)$$

Формула (20) показывает, что при низких температурах ($T \rightarrow 0, \gamma_{sph} \rightarrow 0$) в полуширину вносят вклад H_{sl}, H_{∞} :

$$\delta_2 = \frac{1}{2} (\gamma_{sl} + \gamma_{\infty}). \quad (21)$$

Необходимо отметить, что H_{sl} вносит вклад и в сдвиг Δ резонансных линий (15), (19).

Измерив сдвиг резонансной линии ЯМР несложно найти константу сверхтонкого взаимодействия используя соотношения:

$$\Delta = \frac{a}{\hbar} \langle S^z \rangle . \quad (22)$$

При низких температурах
 $\left(T \rightarrow 0, \langle S^z \rangle \rightarrow \frac{1}{2} \right)$ для определения константы
 Δ получаем простейшее выражение

$$\Delta = \frac{a}{2\hbar} . \quad (23)$$

Сдвиг линии может затруднить наблюдение ЯМР в данном случае, но принципиально возможно.

1. J.K.Furdyna. Diluted magnetic semiconductors, J. App. Phys., 64(4) (1988) 29-65.
2. A.Abragam. The Principles of Nuclear Magnetism, The international series of monographs on physics, (2010) 618.
3. С.А.Альтшулер, Б.М.Козырев. Электронный парамагнитный резонанс, Изд.Наука Москва, (1972) 670.
4. Б.И.Кочелаев. Парамагнитный резонанс, ред. С.А.Альтшулер, Изд. КГУ Казань, (1964) 210.
5. S.V.Tyablikov. Methods in the quantum, Theory of Magnetism, Plenum Press, New York, (1967) 361.

YARIMMAQNIT YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ PARAMAQNIT İONLARIN NÜVƏ MAQNİT REZONANSININ NƏZƏRİYYƏSİ

M.N.ƏLİYEV

Yarimmaqnit yarimkeçiricilərdə paramaqnit aşqarların nüvə maqnit rezonans xəttinin forması ixtiyari temperaturlarda və ionların kiçik konsentrasiyalarında Grin funksiyası metodu ilə tədqiq edilmişdir. Nüvə maqnit rezonansının müşahidə edilmə kriteriyaları təpilmiş, rezonans xəttinin eni və sürüşməsi hesablanmışdır.

THEORY OF THE MAGNETIC RESONANCE OF PARAMAGNETIC ION NUCLEI IN SEMIMAGNETIC SEMICONDUCTORS

M.N.ALIYEV

The line shape of the magnetic resonance of paramagnetic ion nucle in semimagnetic semiconductors at arbitrary temperatures and small ion concentration has been investigated. Observations criteria of the magnetic resonance have been found, resonance line shift and line width have been calculated.

Редактор: д. н. по физике М.Бабаев

УДК 523.532

**СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЕРЕМЕННОСТЬ ЗВЕЗДЫ II СЕР. I.
ЛИНИИ ВОДОРОДА Н_α И Н_β**

Н.З.ИСМАИЛОВ, О.В.ХАЛИЛОВ, Г.Р.БАХАДИНОВА

*Шамахинская астрофизическая обсерватория НАН Азербайджана
AZ5626, г. Шемаха, пос. им.Ю.Маммадалиева.
ismailovn@yahoo.com*

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

Приведены результаты исследований многолетних однородных спектральных наблюдений звезды типа Ae/Be Хербига II Сер. Линии водорода Н_α и Н_β показывают переменную двухкомпонентную структуру. Линия Н_α имеет как одиничный, так и едва разделяемый двухкомпонентный эмиссионный профиль. Эмиссионная линия Н_β четко разделяется глубокой центральной абсорбцией на два компонента. Обнаружено монотонное изменение со временем лучевых скоростей отдельных компонент у этих линий. Отношение интенсивностей пиков синего компонента к красному у водородных линий также показывает монотонное изменение со временем. Как лучевые скорости, так и эквивалентные ширины и полуширины линий водорода показывают монотонное изменение в течение 9 лет, что может быть результатом спектральной двойственности звезды.

Ключевые слова: звезды Ae/Be Хербига, околовзвездные диски, спектральная переменность.

ВВЕДЕНИЕ

Звезды типа Ae/Be Хербига (HAeBes) являются молодыми звездами промежуточных масс ($2 \div 10 M_{\odot}$) и находятся на эволюционной стадии до Главной Последовательности (ГП). Эти звезды в основном имеют спектральные классы B-A-F, типы светимости IV-V. В спектре наблюдаются эмиссионные линии, они находятся в темных областях поглощения, связаны с яркими отражательными туманностями и имеют сильные инфракрасные (ИК) избытки излучения [1-3]. HAeBes являются промежуточным звеном между звездами типа Т Тельца и более массивными звездами. Так же как и классические звезды типа Т Тельца (CTTS), звезды HAeBes окружены околовзвездным остаточным газо-пылевым диском. Диск отражает излучение центральной звезды и является источником теплового излучения в ИК диапазоне. К настоящему времени для некоторых объектов получены прямые изображения структуры околовзвездных дисков (см. напри-

мер, [4,5]). Околовзвездные диски имеют весьма сложную структуру, и по-видимому, акреция вещества из диска на звезду играет значительную роль в переменности спектра и блеска звезды.

Изучение спектра излучения из околовзвездного диска, накладывающийся на атмосферный спектр центральной звезды позволяет выяснить характер взаимодействия центральной звезды и околовзвездного диска. Для CTTS, имеющие массы $0.5 \div 1.5 M_{\odot}$ и обладающие магнитным полем в несколько КГс взаимодействие акреционного вещества из околовзвездного диска и центральной звезды представлено в модели магнитосферной акреции [6,7]. Согласно такой модели давление акреционного вещества компенсируется давлением, созданным магнитным полем. При разрушении такого баланса вещество направляется через силовые линии магнитного поля и баллистическим движением падает на поверхность звезды. Сильные магнитные поля у CTTS могут быть

формированы мощными конвективными зонами.

В случае HAeBes применение модели магнитосферной акреции наталкиваются на трудности. У этих звезд конвективная зона отсутствует, перенос внутренней энергии лучистое [8]. Это отрицательно сказывается к образованию динамо механизма, который способен генерировать сильное магнитное поле звезды. Прямые спектрополяриметрические измерения магнитного поля у звезд типа HAeBes показали, что у некоторых звезд выявляется продольное магнитное поле порядка сотни Гаусс (см.например, [8, 9, 10, 11]).

Звезды HAeBes с более поздним спектральным классом, например, позднее B9, (HAes) могут обладать слабой конвективной зоной, в результате чего они могут иметь достаточно сильные магнитные поля. Например, в работах [12, 13] показано, что HAes имеют околовзвездные диски, контролируемые магнитным полем. В любом случае, расчеты показывают, что HAes с магнитным полем порядка 100 Гс будут иметь гораздо меньшим радиусом магнитосферы, чем CTTS, обладающие магнитным полем порядка КГс. Таким образом, у звезд HAeBes механизмы взаимодействия околовзвездного аккреционного диска и звезды пока остаются открытыми.

Звезда HD 216629=IL СерA ($\alpha_{2000}=22^{\text{h}}53^{\text{m}}16^{\text{s}}$, $\delta_{2000}=+62^{\circ}08'45''$, $V\sim9.3^{\text{m}}$) известна как член молодой ассоциации Сер OB3. На угловом расстоянии около 6''.9 от звезды в оптическом диапазоне наблюдается визуальный компонент IL Сер B=ADS 16341B [14]. Уилрайт и др.[15] показали, что звезда является визуально двойным с угловым расстоянием 0''.44, с компонентом, слабее чем IL Сер A на $\Delta B=3^{\text{m}}.5$. По мнению Ассуза и др. [16] IL СерA является эмиссионным объектом и тесно связано с отражательной туманностью, поэтому является звездой типа Ae/Be Хербига. Как показано в работе Алесиан и др.[17] при использовании величину расстояния до звезды 720pc (см., например, [18]) на эволюционной диаграмме ГР звезда занимает позицию ниже линии ГП. Это означает, что возможно, свети-

мость звезды определяется неверно и звезда не относится к ассоциации СерOB3.

По данным разных авторов спектр был определен как B2IV-V [19], B3e [20], или визуально-двойная с компонентами B3 и B4 [17]. Лучевые скорости по данным разных авторов различаются от -39.4 км/с, до 31 км/с [17, 19, 21], а по линиям межзвездного поглощения CaII от -11км/с до -19км/с [19, 21]. Спектрополяриметрическим методом Алесиан и др.[17] разделили спектр системы на отдельные компоненты. Они показали, что наблюдаемый фотосферный спектр является комбинацией двух одинаковых спектров и система является спектрально-двойной. Также у разных авторов наблюдается значительный разброс значений эквивалентных ширин линии Н_α: -8Å [15], -21Å [21], -10Å [22], -34.5Å [23]. Профиль линии Н_α наблюдается удвоенный с едва разделенными пиками, а линия Н_β показывает два разделенных пика и центральную абсорбцию (см. например, [21]).

Хилл [24] установил периодическую переменность блеска звезды с периодом 1.401^d, что, по мнению автора, могло быть вызвано затмениями в двойной системе. Поэтому звезда была включена в ОКПЗ (Самусь и др., [25]) как затменная типа EA. Позже периодичность не был подтверждена, хотя переменность блеска звезды не вызывала сомнений [26]. Дальнейший анализ фотометрических данных Мельниковым и др. [21] показали, что блеск звезды меняется с периодом 50.91 дней и с амплитудой $\Delta V=0.03^{\text{m}}$. Авторы выявили необычное для звезд типа Ae/Be Хербига свойство IL СерA: отсутствует ИК избыток в ИК части спектра звезды.

Учитывая многочисленных противоречивых результатов, полученных по кратковременным спектральным наблюдениям у разных авторов начиная с 2006г. по настоящее время мы выполняли однородные спектральные наблюдения IL Сер. Часть результатов по нашим наблюдениям был опубликован в работе Исмаилова и др. [27]. Был показан, что лучевые скорости по линии Н_α показывают монотонное убывание и достигает минимума в 2009-2010г.г.

Целю настоящей работы является анализ результатов многолетних спектральных исследований звезды типа HAeBes IL Сер. В этой части работы мы приводим результаты, полученные по линиям водорода $\text{H}\alpha$ и $\text{H}\beta$.

НАБЛЮДЕНИЯ

Спектральные наблюдения были выполнены в 2006–2014 гг. в кассегреновском фокусе 2-м телескопа ШАО НАН Азербайджана. Применялся спектрометр, собранный на базе спектрографа UAGS (Исмаилов и др., [27]; Микаилов и др., [28]). Для данного спектрометра была использована камера Шмидта–Кассегрена с внешним фокусом $f=150\text{мм}$ и диаметром зеркала 105мм. После щели лучи проходят линзу и заполняют зеркало коллиматора параллельным пучком с диаметром 75мм. Плоское зеркало направляет пучок на кросс-диспергирующий элемент. В качестве кросс диспергирующего элемента была использована дифракционная решетка с 325.5штрих/мм. Эта дифракционная решетка, с помощью которой пучок направляется на поверхность основной эшелле решетки. Для получения спектров плоского поля и спектра сравнения применяется передвижная призма, легко вводимая или выводимая из оптической системы.

В фокальной плоскости камеры крепится светоприемник с ПЗС матрицей. Матрица с 530×580 элементами имеет линейный размер $9.5\times 13.9\text{мм}$. Размер одного пикселя $18\times 24\text{ мкм}$. Обратная линейная дисперсия в красной части составляет $10.5\text{\AA}/\text{мм}$, а в синей части около $6\text{\AA}/\text{мм}$. Всю наблюданную область можно охватить за два приема. Спектрометр работает в 70–140 порядках. В красной части на окно ПЗС попадают 28 порядков, а на синюю часть всего 50 порядков. Нормальная ширина щели спектрометра, определяемая размерами ПЗС-элементов матрицы, составляет 0.35 мм, что при эквивалентном фокусном расстоянии фокуса Кассегрена 29500мм, составляет в свою очередь 2.4".

Основным диспергирующим элементом является эшелле решетка с 37.5штрих/мм, имеющей угол блеска 63.5° и размеры $200\times 100\text{мм}$. Решетка работает в автоколлима-

ционном режиме и установлена под углом 26.5° к вертикальной плоскости. Для сбора монохроматических лучей в фокальной плоскости камеры решетка повернута вокруг своей оси на 4° . Такой поворот позволяет сдвинуть центральные длины волн порядков. При этом изображения щели получаются не перпендикулярными к направлению дисперсии, что приводит к потерям в разрешающей силе спектрометра. Так как у классического спектрографа UAGS основной диспергирующий элемент спектрометра располагается перпендикулярно направлению диспергирующего элемента, возникает необходимость развернуть щель спектрометра на угол 90° , а чтобы устранить неперпендикулярность спектральных линий относительной дисперсии, вызванную поворотом эшелле решетки на 4° щель разворачивается еще на угол 15° .

Спектральное разрешение составило $R=14000$; отношение сигнала к шуму в области линии $\text{H}\alpha$ $S/N=80\pm 100$, а в области линии $\text{H}\beta$ $S/N=10\pm 20$. Для контроля стабильности системы в каждую ночь наблюдений в начале и в конце экспозиции объекта получены спектры стандартных звезд, изображение плоского поля и спектр сравнения. Для редукции длин волн был использован спектр дневного неба. Вся обработка изображений, перевод их в стандартный формат *.100 и дальнейшее измерение спектrogramм выполнялись с использованием программы DECH20T разработанных в САО РАН [29].

По отобранным из разных порядков спектра стандартных звезд и спектра дневного света регулярно измерялись спектральные параметры линий. Систематические измерения выбранных линий показывают, что полуширины наиболее чистых атмосферных линий дают хорошую стабильность в пределах стандартного отклонения $\pm 0.04\text{\AA}$. Оценка инструментального контура была выполнена по спектральным линиям спектра сравнения (лампа ThAr) в синей и красной части, которые получились 0.36 и 0.44\AA , соответственно. Среднее значение инструментального контура даже по интенсивной линии аргона $\lambda 6032.124\text{\AA}$ получилась $0.44\pm 0.04\text{\AA}$, что может быть принято за

верхний предел этого параметра. Значения полуширин отдельных линий в наших измерениях меняются в пределах: у Н α 6÷8 Å, у Н β 2÷4 Å, у HeI 5876 4÷7 Å, у D1, D2 NaI 0.8÷1 Å, а у диффузных межзвездных полос (DIB) 5780, 5798 Å 1.5÷2.0 Å. Эти значения значительно превосходят ширину инструментального профиля.

Измерение лучевых скоростей звезд стандартов выполнялось регулярно в каждую ночь наблюдений. Серия наблюдений звезды стандарта, выполненные в течение одной ночи в разных положениях телескопа показало, что максимальное отклонение смещений отдельных спектральных линий не превосходит ошибки измерений. Контрольные измерения лучевых скоростей звезд-стандартов в разные ночи также показывают хорошую стабильность в пределах ошибок.

Журнал наблюдений приводится в табл. 1, где в 1-2 столбцах дается средняя UT дата и время для середины экспозиции. Всего было получено более 50 пар спектрограмм звезды, которые были усреднены за каждую ночь наблюдений. В 2012 г. наблюдения не были проведены из-за ремонта 2 м телескопа. В некоторые ночи были получены 2-3 пары спектрограмм звезды, по ним измеренные параметры также были усреднены за ночь наблюдений.

Были измерены спектральные параметры наиболее сильных спектральных линий: эквивалентные ширины W_λ , полуширины $FWHM$, центральные глубины, определенные как $R_\lambda = 1 - r_\lambda$, где $r_\lambda = I/I_0$ – центральная остаточная интенсивность, и гелиоцентрические лучевые скорости V_r линий водорода Н α и Н β , дублета NaI D1, D2, HeI 5876 Å, а также DIB $\lambda\lambda$ 5780, 5797 Å. Ошибки измерений эквивалентных ширин составили около 5%, а измерений интенсивности – около 1%. Ошибка в позиционных измерениях по спектрам звезд-стандартов составила 2÷3 км/с. Ошибки измерений эквивалентных ширин эмиссии Н $\beta 1$, Н $\beta 2$ и абсорбции HeI λ 5876 Å иногда превышают этот предел из-за более низкого отношения сигнала к шуму в этих участках спектра.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Линия Н α . Наблюдения показывают, что профиль эмиссионной линии Н α меняется в разные годы от одиночного пика до двойного, разделяемые центральной абсорбцией. На рис.1 приведены все профили линии, полученные нами за период наблюдений 2006-2014 гг. Как видно, пик вершины линии в 2006 и 2007 гг. был одиночным, в остальные годы вершина линии удваивается. Интенсивности пиков меняются: сначала в 2006 г. доминирует красный пик. Начиная с 2008 по 2010 г. наблюдается постепенное усиление синего компонента, в 2013 г. вновь наблюдается усиление красного пика. Судя по профилям, полученным в 2014 г. (Рис.1) интенсивности пиков становятся примерно равными. Из Рис.1 видно, что структура профиля Н α в течении одного года заметно не меняется.

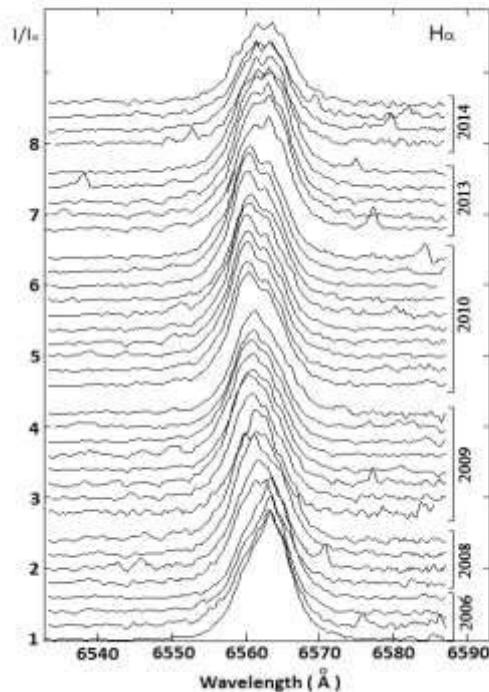


Рис.1
Профили линии Н α полученные, за 2006-2014 гг.

Мы наложили все профили друг на друга так, чтобы совпала шкала длин волн и провели статистический анализ изменений интенсивности каждой точки при данной длине волны.

Таблица 1
Журнал спектральных наблюдений IL Сер

Дата	UT	JD2450000+	Номер спектра	Экспозиция, секунды
12.08.2006	21:20	3960.389	Ks 1709-1710	
16.08.2006	19:52	3964.328	Ks 1751-1752	1500
18.08.2006	18:59	3966.291	Ks 1776-1777	1800
19.08.2006	20:39	3967.36	Ks 1793-1794	1200
20.08.2007	19:01	4333.293	Ks 2163-2164	1800
04.08.2008	18:35	4683.274	Ks 2309-2310	2400
18.08.2008	19:12	4697.317	Ks 2377-2378	1800
22.08.2008	20:32	4701.356	Ks 2414-2415	900
24.08.2008	20:08	4703.339	Ks 2430-2431	1800
25.08.2008	21:35	4704.399	Ks 2444-2445	1800
08.07.2009	21:27	5021.394	Ks 2649-2650	1800
13.07.2009	20:17	5026.345	Ks 2661-2662	2400
21.07.2009	22:17	5034.428	Ks 2713-2714	3600
04.08.2009	21:09	5048.381	Ks 2757-2758	3600
01.09.2009	19:41	5076.32	Ks 2776-2777	3600
02.09.2009	19:41	5077.32	Ks 2786-2787	3600
03.09.2009	18:36	5078.275	Ks 2799-2800	3600
04.09.2009	18:35	5079.274	Ks 2807-2808	3600
04.10.2009	20:50	5109.368	Ks 2866-2867	2400
15.10.2009	20:17	5120.345	Ks 2885-2886	2400
25.10.2009	17:22	5130.224	Ks 2930-2931	2400
01.08.2010	20:11	5410.341	Ks 3408-3409	2400
03.08.2010	20:31	5412.355	Ks 3434-3435	3600
04.08.2010	20:19	5413.347	Ks 3446-3447	3600
08.08.2010	20:28	5417.353	Ks 3512-3513	3600
09.08.2010	21:04	5418.378	Ks 3525-3526	3600
28.08.2010	17:52	5437.245	Ks 3573-3574	3600
30.08.2010	19:59	5439.333	Ks 3603-3604	3600
31.08.2010	18:51	5440.285	Ks 3611-3612	3600
04.09.2010	21:11	5444.383	Ks 3666-3667	3600
07.09.2010	18:07	5447.255	Ks 3689-3690	3600
10.10.2010	20:27	5480.352	Ks 3792-3793	3600
16.11.2010	16:32	5517.189	Ks 3899-3900	3600
07.10.2011	17:52	5842.244	Ks 4380-5481	3600
25.08.2013	20:19	6530.347	KS 4548-4549	3600
28.08.2013	21:03	6533.377	KS4564-4565	2400
29.08.2013	22:56	6534.454	KS4585	2400
01.09.2013	21:23	6537.392	KS4603-4604	2400
19.09.2013	21:31	6554.397	KS4641-4642	2400
17.10.2013	18:56	6584.486	KS4759-4760	2400
24.07.2014	23:14	6863.468	KS5481	3600
29.07.2014	22:56	6868.456	KS5504	3600
01.08.2014	22:56	6871.456	KS5526-5527	3600
07.08.2014	00:11	6876.508	KS5557-5558	3600
08.08.2014	22:59	6878.457	KS 5580	3600
27.08.2014	19:20	6897.306	KS5855-5856	3600
28.08.2014	19:27	6898.310	KS5878-5879	3600

Вычисленное таким образом среднеквадратичное отклонение интенсивности при данной длине волны приведена в той же шкале длин волн, что и профили линии. На Рис.2 на верхней панели видно, что на уровне континуума профиль линии не показывает значительных изменений и имеет ширину 22÷24 \AA . А на уровне вершины наблюдается изменение интенсивности синего и красного пиков. Профиль среднеквадратичного отклонения интенсивности σ при одной и той же длине волны описывает наиболее сильно меняющиеся части профиля линии (Рис.2 нижняя панель). Видно, что значительное изменение интенсивности происходит на вершинах пиков.

Полуширина линии $\text{H}\alpha$ тоже показывает изменений со временем. На Рис.3 приведен график зависимости полуширины линии $\text{H}\alpha$. Как видно, полуширины линии меняются в пределах 7÷9 \AA , и по наблюдениям 2008г. достигают максимального значения.

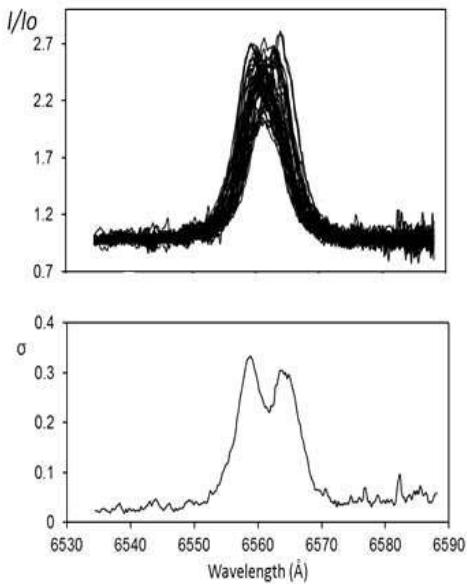


Рис.2

Верхняя панель, все профили линии $\text{H}\alpha$, при одинаковом масштабе по длинам волн. Нижняя панель – распределение дисперсии интенсивностей по длине волны.

Нами были также измерены лучевые скорости отдельных пиков линии $\text{H}\alpha$ а также смещение центра профиля на уровне половины интенсивности. На Рис.4 приводятся зави-

симости лучевых скоростей синего Vr1 (заполненные кружки), красного Vr3 (треугольники) компонент и центральной абсорбции Vr2 (пустые кружки). Как видно, наблюдается плавное уменьшение лучевых скоростей до 2009 г., а затем медленный подъем к прежнему положению. В 2006-2007гг. наблюдается только один красный компонент линии $\text{H}\alpha$, поэтому в эти даты на Рис.4 мы не видим кружков. Кроме того, из Рис.4 можно заметить, что в то время как, смещение Vr красного пика и центральной абсорбции имеет одинаковый интервал переменности около 40км/с, интервал изменений Vr синего пика составляет более 60км/с.

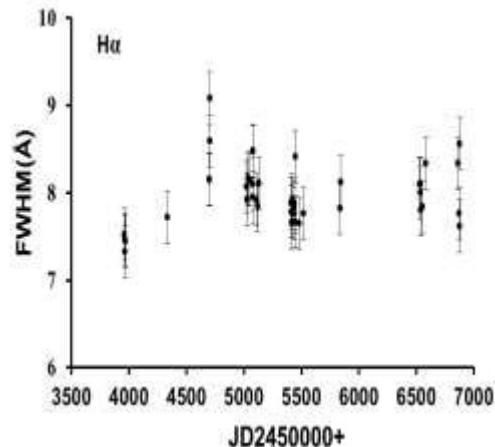


Рис.3
Изменение полуширины линии $\text{H}\alpha$ со временем

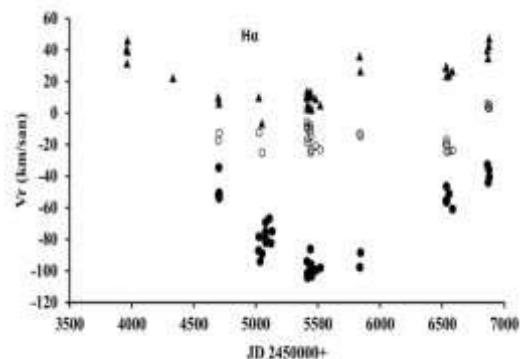


Рис.4
Изменение лучевых скоростей отдельных компонент линии $\text{H}\alpha$. ● Vr1-синий, ○ Vr2-абсорбционный, ▲ Vr3-красный компоненты.

На Рис.5 приведены лучевые скорости эмиссионной линии $\text{H}\alpha$, измеренные по смещению центра линии на уровне половины интенсивности. Как видно, до 2009г. наблюдается плавное смещение центра линии в синюю часть спектра, а затем монотонное возвращение к уровню 2006г. Ход изменений V_r является довольно гладким, общий интервал изменений составляет до 70км/с.

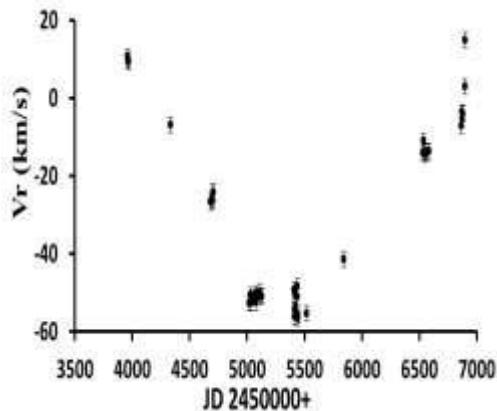


Рис.5

Изменение смещения центра эмиссии $\text{H}\alpha$ со временем, измеренные на уровне полуширины.

На Рис.6 приведено изменение эквивалентных ширин W_λ линии $\text{H}\alpha$ со временем. Как видно, до 2014 г. эквивалентные ширины линии практически имеют небольшой разброс около среднего значения 12 Å.

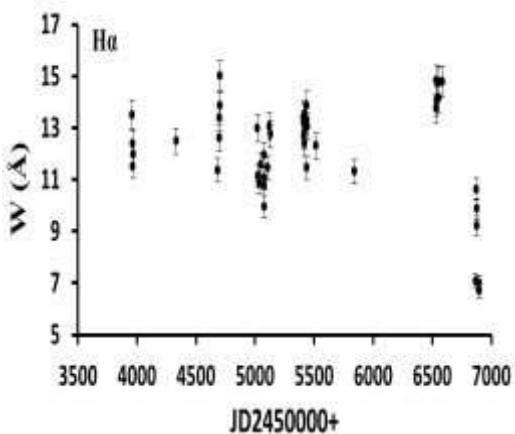


Рис.6

Изменение со временем эквивалентной ширины линии $\text{H}\alpha$.

Наблюдения 2013г. показали, что эквивалентные ширины достигли максимально большие значения до 15Å, а в 2014г. наблюда-

лось необычное уменьшение W_λ до 7Å. Как отмечено во Введении, общий интервал изменений W_λ для линии по данным разных авторов составляет от -8Å [15], до -34.5Å [23].

Линия $\text{H}\beta$. На Рис.7 приведены профили линии $\text{H}\beta$. Как видно, здесь наблюдаются полностью разделенные эмиссионные пики и вершина центральной абсорбции доходит до уровня континуума. Измерения показали, что профили линии меняются по разным годам, часто видно расщепление на дополнительные компоненты каждого из имеющихся эмиссионных пиков. Из Рис.7 видно, что в целом, интенсивности эмиссионных пиков меняются по разным годам, и в целом, сохраняют форму изменений линии $\text{H}\alpha$: в 2006г. наблюдается усиленный красный компонент, затем усиливается синий, а в 2013-2014гг. снова наблюдается усиление красного компонента.

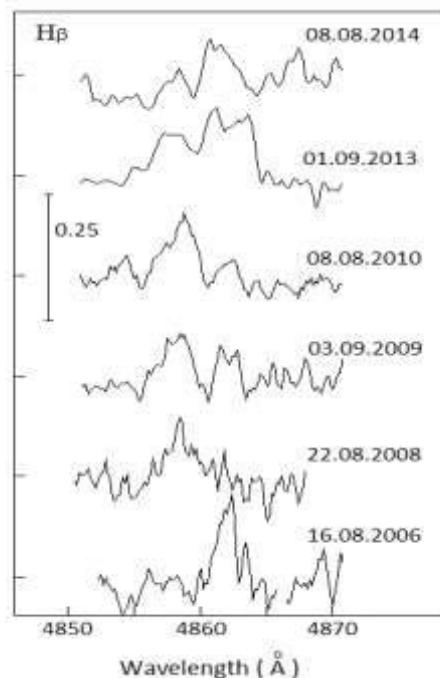


Рис.7

Профили линии $\text{H}\beta$ в спектре IL Сер.

Для наглядности на Рис.8 мы приводим графики изменений со временем относительных интенсивностей (глубины линий) синего I_b компонента к красному I_r для линий $\text{H}\alpha$ (верхняя панель) и $\text{H}\beta$ (нижняя панель). Как видно, отношение I_b/I_r у линии $\text{H}\alpha$

показывает плавное изменение, достигая значений максимума в 2010г. и показывает обратный ход к изменению лучевых скоростей линии $\text{H}\alpha$ (см. Рис.4-5). Возможно, в 2014г. значения параметра начинают возвращаться к прежнему положению.

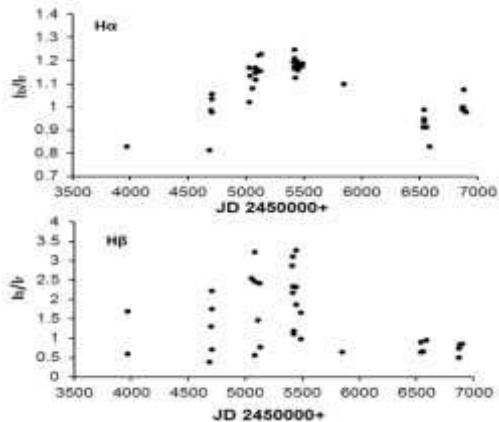


Рис.8

Изменение со временем параметра I_b/I_r для линий $\text{H}\alpha$ (верхняя панель) и $\text{H}\beta$ (нижняя панель).

Для наглядности на Рис.8 мы приводим графики изменений со временем относительных интенсивностей (глубины линий) синего I_b компонента к красному I_r для линий $\text{H}\alpha$ (верхняя панель) и $\text{H}\beta$ (нижняя панель). Как видно, отношение I_b/I_r у линии $\text{H}\alpha$ показывает плавное изменение, достигая значений максимума в 2010г. и показывает обратный ход к изменению лучевых скоростей линии $\text{H}\alpha$ (см. Рис.4-5). Возможно, в 2014г. значения параметра начинают возвращаться к прежнему положению.

Из Рис.8 также видно, что величина I_b/I_r для линии $\text{H}\beta$ в целом, показывает такую же тенденцию: максимум в 2010г., в среднем имеет такую же тенденцию изменений, хотя здесь разброс точек за один год наблюдений значительно больше, чем у $\text{H}\alpha$.

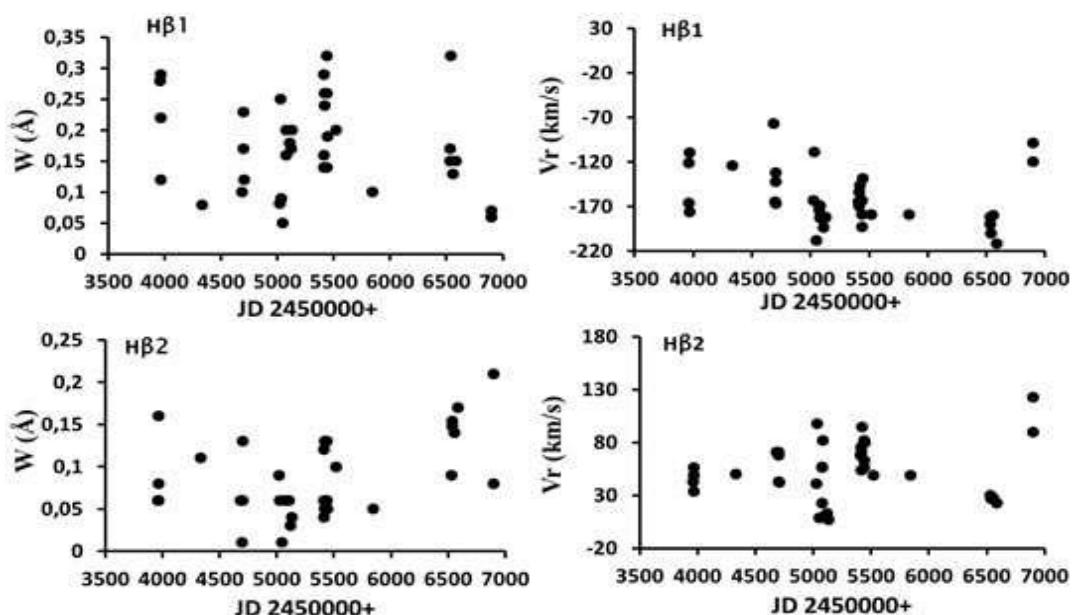


Рис.9

Слева приведено изменение эквивалентных ширин синего $\text{H}\beta 1$ и красного $\text{H}\beta 2$ эмиссионных компонентов линии $\text{H}\beta$, а справа изменение лучевых скоростей этих же компонент со временем.

У Н β мы измерили эквивалентных ширин, а также лучевых скоростей каждого из этих эмиссионных пиков, включая смещение центральной абсорбции. На Рис.9 приведены графики, показывающие временное изменение эквивалентных ширин и лучевых скоростей эмиссионных пиков (синий Н β 1, красный Н β 2) линии Н β . Как видно, эквивалентные ширины отдельных компонент показывают значительный разброс. Такой же разброс наблюдается и по смещениям этих компонент. Тем не менее, в среднем, смещение отдельных эмиссионных компонент сохраняют тенденцию, наблюдающуюся у линии Н α . Наблюдается медленный спад до 2009 г., далее подъем к прежнему значению. Лучевые скорости синего компонента линии в среднем равны -120, -170 км/с, красного компонента +30,+80 км/с, а центральная абсорбция около -20, -80 км/с. Если сравнить эти значения скоростей со скоростью линии Н α , то видно, что в целом, совпадают эти скорости, хотя, существует большие значения смещений на уровне Н β .

В целом, суммарное значение модуля эквивалентных ширин эмиссионных компонент линии Н β намного меньше, чем эквивалентная ширина линии Н α .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, наши спектральные наблюдения звезды Ae/Be Хербига II Сер А показали, что спектральные параметры и профили линий водорода Н и Н за 2006-2014 гг показывали значительных изменений со временем. Изменение всех параметров происходит плавно и непрерывно, достигая при этом экстремума в 2010 г. Такое изменение спектра мы склонны объяснить спектральной двойственностью звезды.

На первый взгляд, например, изменение интенсивностей отдельных компонент в эмиссионных линиях водорода может также сместить центр линии Н α , что в результате это могло бы дать изменение лучевых скоростей, определенных по центру линии. Однако полученный монотонный сдвиг лучевых скоростей отдельных эмиссионных пиков однозначно свиде-

тельствует о существовании динамических процессов. Заметим, что все компоненты эмиссии Н α имеют синхронное изменение лучевых скоростей (рис.3), что может быть указывать на то, что все эти компоненты образуются на одном и том же объекте, точнее на одной и той же оболочке звезды. Судя по интервалу времени монотонного изменения лучевых скоростей общий период такой спектрально-двойной системы может быть около 9 лет или больше. Если II Сер А является спектрально-двойной системой, с периодом более 9 лет, тогда природа второго компонента системы остается открытым.

Как показали разные авторы, скорость вращения звезды около $v \sin i \sim 180$ км/с. При такой скорости фотосферные линии имели бы расширение около 4 Å. Эмиссионные линии Н α и Н β имеют ширину на уровне половины интенсивности около 8 Å, т.е. намного шире, чем фотосферные линии звезды. Это могло бы признаком дискового ветра.

Таким образом, наши наблюдения выявили следующие наблюдательные факты по водородным линиям Н α и Н β :

1. Линия Н α показывает как однокомпонентную, так и двухкомпонентную эмиссию, выделенную неглубоким центральным поглощением. Линия Н β показывает два полностью разделенных центральной абсорбцией эмиссионных пика. Профили этих линий являются переменными со временем.
2. Отношение интенсивностей синего компонента к красному I_b/I_r показывает монотонное изменение и достигает максимума в 2010 г. Такая же тенденция наблюдается и для линии Н β .
3. Смещение эмиссионных пиков, а также центра линии Н α на уровне половины полной интенсивности показывают монотонное изменение, имеющее минимум в 2010 г. Такой же характер переменности лучевых скоростей показывают компоненты линии Н β .
4. Эквивалентная ширина Н α за 2006-2013 гг. показывает слабый разброс ± 2 Å около среднего значения 12 Å. Только в 2014 г.

наблюдано необычное уменьшение эквивалентной ширины до 7Å. Эквивалентная ширина у линии Н_β по разным годам показала значительное изменение.

Как было отмечено во Введении, некоторые результаты по IL Сер А, полученные разными авторами являются запутанными и не позволяют определить точные фундаментальные физические параметры звезды. Здесь мы обсудим некоторые из таких противоречий.

В работе Лю и др. [30] приведены возможные параметры звезды, используя моделирование распределение энергии в спектре (РЭС). По данным этих авторов, распределение энергии имеет избыток в интервале 10-100 мкм и ничем особенно не отличается от РЭС остальных звезд типа Ae/Be Хербига.

Спектральный класс звезды по спектру впервые был определен Гаррисоном [31] как B2IV-Vne. При этом, цветовые показатели звезды, определены как $\langle B-V \rangle = 0.72$ [18,21,32]. Для звезды со спектром B2V нормальные показатели цвета равны $(B-V)_0 = -0.24$ [33]. Следовательно, избыток $E(B-V) = 0.96$, при $R=3.1$ получим $A_V = 2.98$.

Дискуссионным является величина расстояния до звезды, которое в ранних работах

оценивается около 690÷725пс (см.например, [18, 30]). Значение параллакса для звезды был взят из работы [34], и [35] где приведено значение $\pi = 1.20\text{mas}$ и $\pi = 1.19\text{mas}$, соответственно. Тогда расстояние до звезды можно определить, как 833÷840пс, что в пределах ошибок согласуется с данными [36]. Тогда с учетом величины поглощения для абсолютной звездной величины звезды получим $M_V = -3.24$, что согласуется для светимости звезды со спектром B2V [37]. Теперь применения эволюционных изолиний [38] по диаграмме ГР мы оценили нижний предел массы $M \geq 3M_{\odot}$ и возраст системы $t = 10^6$ г.

Таким образом, полученные параметры свидетельствуют о том, что звезда IL Сер А является типичной молодой звездой типа Be Хербига, и является членом ассоциации СерOB3. Заметим, что если наше предположение о двойственности звезды верно, то физические параметры звезды будут уточняться. Более подробный анализ результатов наших наблюдений предполагается выполнить в следующей части нашей работы.

Данная работа было выполнено в рамках проекта по приоритетным направлениям при поддержке НАН Азербайджана.

1. G.H.Herbig. *The Spectra of Be- and Ae-TYPE Stars Associated with Nebulosity*, *ApJS*, **4** (1960) 337-368.
2. P.S.The, D. de Winter, M.R.Perez. *A new catalogue of members and candidate members of the Herbig Ae/Be (HAEBE) stellar group*, *A&AS*, **104** (1994) 315-339.
3. S.L.A.Vieira, W.J.B.Corradi, S.H.P.Alencar, L.T.S.Mendes, C.A.O.Torres, G.R.Quast, M.M.Guimarães da Silva. *Investigation of 131 Herbig Ae/Be Candidate Stars*, *AJ*, **126** (2003) 2971-2987.
4. C.A.Grady, B.F.Woodgate, C.W.Bowers, et al. *Coronagraphic Imaging of Pre-Main-Sequence Stars with the Hubble Space Telescope Space Telescope Imaging Spectrograph. I. The Herbig Ae Stars*, *Ap. J.*, **630** (2005) 958-975.
5. M.Fukagawa, M.Hayashi, M.Tamura, et al. *Spiral Structure in the Circumstellar Disk around AB Aurigae*. *Ap. J.*, **605** (2004) L53-L56.
6. J.Muzerolle, N.Calvet, L.Hartmann. *Magneto-spheric Accretion Models for the Hydrogen Emission Lines of T Tauri Stars*, *ApJ*, **492** (1998) 743-753.
7. A.C.Кравцова, С.А.Ламзин. *Особенности распределения энергии в УФ континууме звезд типа Т Тельца*, *Письма в Астрон.журн.* **29** (2003) 643.
8. S. Hubrig, B.Stelzer, M.Schöller, et al. *Searching for a link between the magnetic nature and other observed properties of Herbig Ae/Be stars and stars with debris disks*, *A&A*, **502** (2009) 283-301.
9. G.A.Wade, S.Bagnulo, D.Drouin, et al. *A search for strong, ordered magnetic fields in Herbig Ae/Be stars*, *MNRAS*, **376** (2007) 1145-1161.
10. S.Hubrig, M.A.Pogodin, R.V.Yudin, et al. *The magnetic field in the photospheric and circumstellar components of Herbig Ae stars*, *A&A*, **463** (2007) 1039-1046.
11. S.Hubrig, M.Schöller, I.Ilyin, et al. *Characterising the magnetic fields of the Herbig Ae/Be stars HD 97048, HD 150193, HD 176386, and MWC 48*, *A&A*, **536** (2011) 8.

12. J.Muzerolle, P.D'Alessio, N.Calvet, et al. *Magnetospheres and Disk Accretion in Herbig Ae/Be Stars*, *ApJ*, **617** (2004) 406-417.
13. C.A.Grady, K.Hamaguchi, G.Scheider, et al. *Locating the Accretion Footprint on a Herbig Ae Star: MWC 48*, *ApJ*, **719** (2010) 1565-1581.
14. N.Pirzkal, E.J.Spillar, H.M.Dyck. *A Search for Close Bright Companions to AeBe Stars*, *ApJ*, **481** (1997) 392-395.
15. H.E.Wheelwright, R.D.Oudmaijer, S.P.Goodwin. *The mass ratio and formation mechanisms of Herbig Ae/Be star binary system*, *MNRAS*, **401** (2010) 1199-1218.
16. G.E.Assousa, W.Herbst, K.C.Turner. *Supernova-induced star formation in Cepheus OB3* *Ap. J.*, **218** (1977) L13-L15.
17. E.Alesian, G.A.Wade, C.Catala, et al., *A high-resolution spectropolarimetric survey of Herbig Ae/Be stars - I. Observations and measurements*, *MNRAS*, **429** (2013) 1001-1026.
18. D.L.Crawford, J.V.Barnes. *Four-color and Hbeta photometry for open clusters. VI. The association III Cephei*, *AJ*, **75** (1970) 952-956.
19. C.D.Garmany, *Internal motions in the association Cep OB3*, *A.J.*, **78** (1973) 185-191.
20. U.Finkenzeller. *Rotational velocities, spectral types, and forbidden lines of Herbig Ae/Be stars*, *A&A*, **151** (1985) 340-348.
21. S.Yu.Melnikov, V.S.Shevchenko, K.N.Grankin, M.A.Ibragimov, S.D.Yakibov. *HD 216629=IL Cep, BHJ 71, and LkH_{alpha} 350--Probable Herbig Ae/Be stars in the Cep OB3 association: HD 216629 AB and LkH_{alpha} 350*, *Astronomy Reports*, **40** (1996) 350-357.
22. U.Finkenzeller, R.Mundt. *The Herbig Ae/Be stars associated with nebulosity*, *A&AS*, **55** (1984) 109-141.
23. B.Acke, M.E.van den Ancker, C.P.Dullemond. *[O II] 6300Å emission in Herbig Ae/Be systems: Signature of Keplerian rotation*, *A&A*, **436** (2005) 209-230.
24. G.Hill. *Some new variables in nearby association and galactic clusters*, *ApJS*, **14** (1967) 301-306.
25. N.N.Samus, O.V.Durlevich, E.V.Kazarovets, N.N.Kireeva, E.N.Pastukhova, A.V.Zharova et al. *Electronic version of the third volume of the general catalogue of variable stars with improved coordinates, GCVS database*, Version (2012).
26. G.Hill, R.W.Hilditch, E.L.Pfannenschmidt et al. *Photoelectric measures of variable stars observed at Mt. Kobau (1970 - 73)*. *Publ. Dom. Astrophys. Observ.*, **15** (1976) 1-35.
27. Н.З.Исмаилов, Г.Р.Бахаддинова, О.В.Халилов, Х.М.Микаилов. *Спектральная Переменность IL Цефея*, *Астрофиз. Бюлл.*, **68** (2013) 207-219.
28. Х.М.Микаилов, В.М.Халилов, И.А.Алекберов. *Эшелле-спектрометр фокуса Кас-сгрена 2-м телескопа ШАО НАН Азербайджана. Циркуляр ШАО*, **109** (2005) 21-29.
29. Г.А.Галазутдинов. *Обработка астрономических спектров в OC Windows с помощью программ DECH Препринт, CAO РАН*, **92** (1992).
30. Tie Liu, Huawei Zhang, Yuefang Wu, Sheng-Li Qin and Martin Miller. *Evolution of the dust/gas environment around Herbig Ae/Be stars*, *ApJ*, **734** (2011) 22-38.
31. R.F.Garrison. *Spectral classification in the association III Cephei and the ratio of total-to-selective absorption*. *A. J.*, **75** (1970) 1001-1006.
32. A.Blaauw, W.A.Hiltner. *Astron. J.*, **130** 69 (1959).
33. В.Л.Страйжис. *Многоцветная фотометрия звезд. Фотометрические системы и методы*, Вильнюс, Мосглас, (1977) 312.
34. M.E.van den Ancker, D.de Winter, H.R.E. Tjin A Djie. *HIPPARCOS photometry of Herbig Ae/Be stars*, *A&A*, **330** (1998) 145-154.
35. M.A.C.Perryman. ESA eds, 1997, The HIPPARCOS and TYCHO catalogues Vol. 1200 of ESA-SP.
36. M.A.Moreno-Corral, K.C.Chavarria, E.de Lara & S.Wagner. *Ha Interferometric Optical and Near Infrared Photometric Studies of Star Forming Regions - Part One - the Cepheus-B / SH:2-155 / CEPHEUS-OB3 Association Complex*, *A&A*, **273** (1993) 619.
37. В.Л.Страйжис. *Звезды с дефицитом металлов*. Вильнюс, Мосглас, (1982) 312.
38. S.W.Stahler. *The birthline for low-mass stars*, *Ap. J.*, **274** (1983) 822-829.

**IL CEP A ULDUZUNUN OPTİK SPEKTRİNİN DƏYİŞKƏNLİYİ.
I. HİDROGENİN $H\alpha$ VƏ $H\beta$ XƏTLƏRİ**

N.Z.İSMAYILOV, O.V.XƏLİLOV, G.R.BAHƏDDİNOVA

İşdə Ae/Be Herbiq tipli IL Cep ulduzunun çoxillik bircins müşahidələrinin tədqiqinin nəticələri verilir. $H\alpha$ şüalanma xətti həm bir komponentli, həm də çətinliklə ayrıd oluna bilən ikikomponentli profilə malikdir. $H\beta$ şüalanma xətti dərin mərkəzi udulma ilə ayrılan aşkar ikikomponentli profil göstərir. Bu xətlərin ayrı-ayrı komponentlərinin şüa sürətlərinin zamana görə monoton dəyişməsi aşkar edilmişdir. Bununla yanaşı hidrogen xətlərinin göy və qırmızı komponentlərinin piklərinin intensivlikləri nisbəti də monoton dəyişmə göstərir.

Hidrogen xətlərinin şüa sürətlərinin, ekvivalent enlərinin və yarımenlərinin 9 il ərzində monoton dəyişməsi ulduzun spektral qoşalığı ilə bağlı ola bilər.

OPTICAL SPECTRUM VARIABILITY of IL Cep A. I. The $H\alpha$ and $H\beta$ LINES OF HYDROGEN

N.Z.İSMAYILOV, O.V.KHALILOV, G.R.BAHADDINOVA

The results of studies of long-term homogeneous spectral observations of the Ae/Be Herbig type star IL Cep have been presented. The line $H\alpha$ has both single and double has peaked variable emission profile. Emission line $H\beta$ clearly has divided by a deep central absorption component into two separate emission components. It has been found a monotonic variation of the radial velocities of the individual components of these lines. The intensity ratio of peaks of blue to red components in the hydrogen lines also has shown a monotonic variability with time.

Such monotonic variations for 9 years of radial velocities, equivalent widths and half-widths of hydrogen lines may be a result of spectral binarity of the star

Редактор: чл-корр. Н.Джалилов

УДК 523.532

МЕТЕОРОИДНЫЕ РОИ КАК ВОЗМОЖНЫЙ ФАКТОР АКТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ В КОМЕТНЫХ ЯДРАХ

А.С.ГУЛИЕВ, Г.И.КОХИРОВА*, У.Д.ПОЛАДОВА

Шамахинская астрофизическая обсерватория НАН Азербайджана
AZ5626, г. Шемаха, пос. им.Ю.Маммедалиева.

Институт астрофизики Академии наук Республики Таджикистан*
734042, г.Душанбе, ул.Бухоро 22
kokhirova.2004@mail.ru

Поступила: 16.06. 2015

Принята к печати: 22.07.2015

РЕФЕРАТ

Рассматрены динамические особенности 113 комет, подвергшихся делению ядер, и 116 комет, имеющих вспышки блеска. Исследованы отдельные аспекты гипотезы деления и вспышки блеска происходящих в результате ударов в период прохождения ядер через метеоридные рои. Для анализа этого предположения вначале исследовано расположение орбит разделившихся комет в зонах вблизи некоторых метеорных потоков. По методике [1] исследовано распределение узлов кометных орбит вдоль орбит потоков на различных расстояниях. Аналогичным образом изучены явления вспышек комет. Результаты показывают, что прохождение комет через метеоридные рои может приводить к разделению кометных ядер и вспышкам их яркости.

Ключевые слова: комета, метеоридные рои, распад комет

ВВЕДЕНИЕ

Распад кометных ядер на несколько фрагментов является весьма интересным и распространенным явлением. Тем не менее, единого мнения среди специалистов о причинах таких явлений не существует. Не исключено, что разделение кометных ядер происходит по различным причинам, не имеющим ничего общего между собой. В литературе по физике комет обсуждаются различные причины, приводящие к разделению кометных ядер. Среди них основными являются: приливное воздействие со стороны Солнца; гравитационное влияние планет-гигантов, с которыми кометные ядра сближаются до распада; неравномерная сублимация на поверхности кометного ядра, в результате которой оно принимает форму гантели и делится на две или более частей; вращательная неустойчивость ядра и т.д.

Настоящая статья посвящается проверке одного из возможных механизмов распада кометных ядер, предложенного в работе [1]. Согласно этому механизму распад происходит вследствие прохождения кометных ядер через метеоридные рои и получения ими разрушительных ударов. Автор работы [1] считает, что именно таким путем образовались известные семейства коротко-перигелийных комет Крейца, Мейера, Крахта, Марсдена и т.д. В настоящей работе рассмотрены статистические аспекты данной идеи для комет с перигелийными расстояниями больше 0.1а.е. Для исследования явления мы составили собственный список комет, используя следующие источники:

1. Список, предложенный Ибадиновым [2];
2. Данные, заимствованные из работы [3];
3. Данные по парам комет-близнецов, отличающихся моментами прохождения через

перигелий в пределах всего лишь нескольких лет [4];

4. Данные об исчезнувших кометах, получивших обозначение D , среди которых комета Биэлы приведена с обозначением $3D$;

5. Данные каталога Марсдена и Уильямса [5], а также данные, приведенные в электронных циркулярах МРЕС за 2008-2013 гг.

Составленный таким образом список включает 113 комет. Первичный анализ показывает, что значения орбитальных параметров исследуемых комет не обладают какими-то специфическими свойствами. Далее мы провели анализ распределения орбит распавшихся комет относительно плоскости орбит 58 наблюдаемых метеорных потоков, данные о которых содержатся в каталоге Кука [6]. Первоначально мы полагали, что если количество узлов орбит распавшихся комет в отдельных зонах движения метеоридных роев, порождающих соответствующие метеорные потоки, заметно увеличивается, то такие рои заслуживает быть предметом анализа в качестве серьезного фактора в распаде кометных ядер.

Сами расчеты состоят из нескольких этапов. На первом этапе на основе методики, использованной в работе [7], а также, применяя формулы сферической астрономии, вычисляются элементы орбит исследуемых комет относительно плоскости орбиты каждого метеорного потока. При этом за точку отсчета в вычислениях угловых элементов орбиты кометы принимается значение восходящего узла орбиты выбранного потока. Затем вычисляются гелиоцентрические расстояния ближних и дальних узлов кометных орбит с помощью формулы

$$r_k = a_k(1-e_k^2)/(1 \pm e_k \cos \omega'), \quad (1)$$

где a_k и e_k – большая полуось и эксцентриситет кометной орбиты, а ω' – аргумент перигелия в новой системе отсчета.

При этом гелиоцентрическое расстояние до потока r_s в направлении ближнего узла кометной орбиты определяется по формуле

$$r_s = a_s(1-e_s^2)/(1+e_s \cos(\omega_s + \Omega')), \quad (2)$$

если соответствующий узел кометной орбиты является дальним, тогда используется следующая формула

$$r_s = a_s(1-e_s^2)/(1+e_s \cos(\omega_s + \Omega' + 180^\circ)). \quad (3)$$

В соотношениях (2)-(3) a_s , e_s и ω_s – элементы орбиты потока, а Ω' – угловое значение узла кометной орбиты в плоскости орбиты потока. Далее в ходе анализа будем использовать величину Δ , являющуюся абсолютным значением разности между r_k и r_s .

$$\Delta = |r_k - r_s|$$

Для этого параметра мы рассмотрели 5 вариантов, когда они равняются соответственно 0.001, 0.005, 0.01, 0.05 и 0.1 а.е.

Определив количество узлов N , попавших в заданный интервал, аналогичная задача решается для других «псевдо-потоков», полученных путем варьирования значений долготы восходящего узла Ω_s и наклона i_s орбиты выбранного метеорного потока. Найденные таким образом количества узлов n_i сравниваются с величиной N на основе соответствующих методов математической статистики. При этом значения Ω_s варьируются от 0° до 330° с шагом 30° , а значения i от 0° до 90° с таким шагом, чтобы полюса соответствующих плоскостей на небесной сфере были равноудалены друг от друга. Для выполнения последнего требования мы варьировали значение $\sin i_s$ от 0 до 1 с интервалом 0.167. Тогда количество «псевдо-потоков» оказывается равным 67

В конечном счете, кроме N и n_i определяются следующие величины: n_{cp} – средняя величина кометных узлов по рассматриваемым 67 зонам различной ширины, σ -среднеквадратичное отклонение ($t = (N - n_{cp})/\sigma$) – нормированная разность, и α -доверительная вероятность, которая получается путем отсчитывания уровня значимости от 1. Для проверки достоверности величин t и α целесообразно использовать односторонний критерий Стьюдента, что приводит к значениям 1.67 и 0.95, соответственно. Отметим, что этот способ сравнения и тестиро-

вания использован и в следующих этапах исследования.

В Таблице 1 приводятся результаты расчетов для 113 рассматриваемых комет и тех потоков, для которых доверительная значимость параметра t составляет больше 0.95.

Таблица 1

Дисперсионные величины распавшихся комет относительно некоторых метеоридных роев

Метеорный поток	N	n_{cp}	σ	t
<i>вариант $\Delta = 0.001$ а.е.</i>				
Camelopardalids	1	0.06	0.3	3.18
τ -Herculids	1	0.03	0.17	5.66
Daytime ζ -Perseids	1	0.07	0.32	2.92
Perseids	1	0.09	0.29	3.16
December Phoenicids	1	0.01	0.12	8.06
<i>вариант $\Delta = 0.005$ а.е.</i>				
κ -Cygns	1	0.10	0.308	2.91
<i>вариант $\Delta = 0.01$ а.е.</i>				
Northern δ -Aquariids	2	0.39	0.58	2.8
α -Capricornids	2	0.61	0.74	1.88
Aurigids	1	0.03	0.17	5.66
<i>вариант $\Delta = 0.05$ а.е.</i>				
July Phoenicids	8	2.54	1.44	3.8
<i>вариант $\Delta = 0.1$ а.е.</i>				
α -Scorpiids	11	5.87	2.70	1.90
χ -Scorpiids	13	7.52	3.09	1.77

В целом данные Таблице 1 показывают, что столкновение с метеороидными роями может рассматриваться как одна из возможных причин распада комет.

Аналогичным образом сделан MOID – анализ (MOID – минимальное межорбитальное расстояние кометы и метеорного потока). Для расчета MOID использована следующая формула, которая легко получается из сферической астрономии, если искомое расстояние есть разность между векторами Солнце-комета и Солнце-поток

$$r' = \left(R^2 + \left[\frac{q_k(1+e_k)}{1+e_k \cos \nu'} \right]^2 - \frac{2R q_k(1+e_k)}{1+e_k \cos \nu'} \sqrt{1 - \sin^2 i' \times \sin^2(\omega' - \nu')} \right)^{0.5},$$

здесь R – гелиоцентрическое расстояние потока в указанном направлении, i' и ω' – угловые элементы орбиты кометы относительно плоскости движения потока, q_k – перигелийное расстояние кометы, ν' – истинная аномалия, значения которой в расчетах для определения минимума варьируются от 0° до 360° с интервалом 1° . Расчеты проводились в рамках вышеописанного алгоритма при трех вариантах значений параметра Δ : 0.01, 0.05 и 0.1 а.е. Результаты приводятся в Таблице 2. Они удовлетворительно согласуются с выводами сделанных из предыдущих расчетов.

Таблица 2

Результаты MOID-анализа для 113 распавшихся комет и 58 метеорных потоков

Метеорный поток	N	n_{cp}	σ	t
<i>вариант $r' = 0.01$ а.е.</i>				
θ-Ophiuchiids	2	0.31	0.63	2.67
κ -Cygns	2	0.09	0.29	6.64
ε -Geminids	2	0.16	0.37	4.92
Ursids	2	0.15	0.36	5.15
<i>вариант $r' = 0.05$ а.е.</i>				
σ -Leonids	7	2.24	1.35	3.53
ϕ -Bootids	5	2.54	1.45	1.70
τ -Herculids	6	2.93	1.88	1.64
Northern δ -Aquariids	3	1.07	0.94	2.04
Southern Taurids	4	1.9	1.38	1.52
July Phoenicids	5	2.42	1.5	1.72
Andromedids	5	2.37	1.55	1.70
October Draconids	6	2.63	1.85	1.82
December Phoenicids	7	2.82	1.58	2.65
Leonids	4	1.84	1.2	1.80
Monocerotids	2	0.57	0.76	1.88
σ -Hydrids	3	1.09	0.83	2.30
<i>вариант $r' = 0.1$ а.е.</i>				
Northern ι -Aquariids	7	3.28	1.43	2.59
χ -Scorpiids	10	4.9	1.96	2.60
Virginids	6	2.93	1.43	2.15

Аналогичным способом рассмотрена степень близости орбит комет, проявляющих вспышки блеска, к метеорным потокам из списка Кука [6]. При этом использован каталог вспышек блеска комет, составленный в Шама-

хинской Астрофизической Обсерватории [8,9]. Этот каталог содержит 116 комет. Результаты MOID-анализа для этих комет приводятся в Таблице 3.

Таблица 3

Результаты MOID-анализа для орбит 113 распавшихся комет, проявляющих вспышки блеска

вариант $r' = 0.001\text{a.e.}$			
Camelopardalids	1	0.06	0.3
t Herculids	1	0.03	0.17
Daytime z Perseids	1	0.07	0.32
Perseids	1	0.09	0.29
December Phoenicids	1	0.01	0.12
вариант $r' = 0.005\text{a.e.}$			
Southern Piscids	1	0.3	0.53
k Cygnids	1	0.1	0.308
вариант $r' = 0.01\text{a.e.}$			
Northern d Aquarids	2	0.39	0.58
Southern d Aquarids	1	0.3	0.58
a Capricornids	2	0.61	0.74
Aurigids	1	0.03	0.17
вариант $r' = 0.05\text{a.e.}$			
d Cancriids	7	4.09	1.96
July Phoenicids	8	2.54	1.439
вариант $r' = 0.1\text{a.e.}$			
d Leonids	13	8.58	3.37
a Scorpriids	11	5.87	2.7
c Scorpriids	13	7.5224	3.09

ВЫВОДЫ

Вычисления и анализ результатов показывают, что есть основания считать столкновение комет с метеороидными роями одной из причин распада кометных ядер и вспышек их блеска. Прохождение комет через плотные слои роев и, как следствие, получение разрушительных ударов от метеороидных роев может привести к тому, что кометные ядра либо сразу могут распасться на несколько частей, либо на их поверхности могут образоваться

трещины, которые впоследствии могут привести к делению ядер. Слабые удары могут привести к выбросу веществ за пределы ядер. Это может быть причиной возрастания блеска комет. Не исключено прохождение отдельных комет через несколько потоков. Для развития предложенной гипотезы необходимо проведение модельных расчетов с вариацией начальных условий: плотности роев, скорости и угла ударов, массы кометных ядер и метеороидов и т.д. В расчетах использованы данные наблюдаемых метеорных потоков, приведенные в каталоге Кука [6], считающиеся наиболее подтвержденными. Для более полного изучения явления распада комет необходимо исследовать также и другие наиболее мощные метеорные потоки, не содержащиеся в данном каталоге.

1. A.S.Guliev. *Origin of short-perihelion comets. Baku: Publishing comp., Elm, (2010) 51.*
2. Х.И.Ибадинов. *Дезинтеграция кометных ядер, Диссертация на соискание степени д. ф. н., М.: ИКИРАН, (1998) 296.*
3. H.Boehnhardt. *Comet splitting—observations and model scenarios, Earths, Moon, Planets, 89 (2005) 91-115.*
4. А.С.Гулиев, Ш.А.Набиев. *Кометы—близнецы, Астрон. журн. Азербайджана, 1-2 (2006), 5-9.*
5. B.G.Marsden, G.V.Williams. *Catalogue of Cometary Orbits. 17-th edition.SAO, Cambridge, (2008)*
6. A.F.Cook. *A working list of meteor streams in "Evolutionary and Physical Properties of Meteoroids"eds. C.L.Hemenway, P.M.Millman, A.F.Cook Washington, DC: NASA, 319 (1973) 183-191.*
7. A.S.Guliev, G.I.Kokhirova, U.D.Polandova. *Comet outbursts and the meteor showers. Proceed. Of the Meteoroid 2013 conf. eds. Jopek T.J. et al. A.M. Univ. Press. (2013) 263-266.*
8. A.S.Guliyev, G.I.Kokhirova, U.D.Polandova. *Comet outbursts and the meteor showers, Proceedings of the International Conference held at the Adam Mickiewicz University in Poznan, Poland, (2013) 263-267.*
9. А.С.Гулиев, Г.И.Кокирова, У.Д.Поладова. *О возможной роли метеорных потоков во вспышечной активности комет. Астрон. журн. Азербайджана, 8 №4 (2013) 5-9.*

METEORİD SELLƏRİ KOMET NÜVƏLƏRİNDEKİ AKTİV PROSESLƏRİN MÜMKÜN FAKTORU KİMİ

Ə.S.QULİYEV, G.İ.KOXIROVA, Ü.C.POLADOVA

Məqalədə 113 parçalanın və 116 parıltıya malik kometin dinamik xüsusiyyətləri öyrənilmişdir. Parçalanmanın və parıltının kometlərin meteorid sellərindən keçərkən aldığı zərbələrin nəticəsi olması haqqında hipotezin ayrı-ayrı aspektləri tədqiq olunur. Təhlilin əvvəlində parçalanmaya məruz qalan kometlərin orbitlərinin meteor sellərinə yaxınlığı öyrənilir. Müəlliflərin birinə mənsub olan metodun köməyi ilə komet orbitlərinin düyün nöqtələrinin sellərin müxtəlif ətrafında paylanması öyrənilmişdir. Elə həmin yolla kometlərin parıltısı məsələsi tədqiq olunur. Nəticələr göstərir ki, kometlərin sellərdən keçməsi nüvələrin parçalanmasına və parıltılara səbəb ola bilər.

**ON POSSIBLE ROLE OF METEOR STREAMS IN THE SPLITTING
OF COMETARY NUCLEI**

A.S. GULIYEV, G. I.KOKHIROVA, U.J.POLADOVA

The dynamic properties of 113 comets, whose nuclei have been undergoing to the fragmentation and 116 flashing comets have been investigated. Some aspects of the splitting and flare of comets have been investigated, as a result, of blows while passing them through a meteor stream. At first considered the proximity of the orbit of comets, suffering to splitting to the meteor has showered. Using the method developed by one of the authors the distribution of nodes of comet orbits in a neighborhood of the meteor showers have been investigated. With the analogous method the flares of the comets also have been investigated. Our research has shown that the splitting and flash of comets may be as a result of their passage through the meteor shower.

Редактор: к. ф-м. н. А.Атаи

UOT 524.31.01-36

HD 161796 (F3 Ib ULDUZUNUN ATMOSFER PARAMETRLƏRİNİN TƏYİNİ

Ə.R.HƏSƏNOVA, Ə.M.XƏLİLOV, G.M.HACIYEVA

AMEA N.Tusi adına Şamaxı Astrofizika Rəsədxanası
AZ5626, Şamaxı r., Y.Məmmədəliyev qəs.
xalilov1955@rambler.ru

Daxil olub: 18.05.2015

Çapa verilib: 22.06.2015

Açar sözlər: fundamental parametrlər, ifratnəhəng ulduzlar, atmosfer modelləri.

REFERAT

ŞAR-in 2-m teleskopunda alınmış spektrlər əsasında HD161796 ulduzu tədqiq olunmuşdur. Ulduzu xarakterizə edən bəzi spektral və fotometrik parametrlərin müşahidədən tapılmış və nəzəri hesablanmış qiymətlərinin müqayisəsi və parallaksın tətbiqi üsulu əsasında HD161796 ulduzunun effektiv temperaturu və səthində ağırlıq qüvvəsinin təcili təyin edilmişdir: $T_{\text{eff}}=6680 \pm 200$, $\log g=1.8 \pm 0.2$.

GİRİŞ

Müasir təkamül nəzəriyyəsinə görə ifratnəhəng ulduzlar yaşına görə cavan və kütləcə böyük olmalıdır, lakin elə həmin nəzəriyyəyə görə cavan və kütləcə böyük ulduzlar Qalaktika müstəvisinə yaxın yerləşməlidirlər. Bidelman [1], ilk dəfə 1951-ci ildə Qalaktika müstəvisindən uzaqda 22° və yaxud daha yüksək enlikdə yerləşən A və F tipi ifratnəhəng ulduzların mövcud olduğunu müşahidə etmişdir. 50 ildən artıq vaxt keçməsinə baxmayaraq belə ulduzların təkamül mərhələləri hələ də öz aydın izahını tapmamışdır. Yüksək enlikdə yerləşən ifratnəhəng ulduzların təkamülü haqqında bir neçə fərziyyə mövcuddur. 1) Qalaktika müstəvisində yaranan cavan, kütləsi böyük ulduzlar qrupu olub, sonralar Qalaktika müstəvisini tərk edərək uzaqlaşmışdır; 2) təkamülün sonunda yüksək işıqlılığa malik olan qoca, kütləsi kiçik olan ulduzlar qrupu; 3) Qoşa ulduzların təkamülü nəticəsində yaranan ulduzlar. Müşahidədən alınmış nəticələrin əksəriyyəti ikinci fərziyyənin doğruluğunu sübut edir. Qalaktika müstəvisində xeyli uzaqda, yaşılı, bəzi kürəvi topalarında A və F tipi ifratnəhəng ulduzların müşahidə olunması artıq bir çox alimlərin tədqiqat obyektinə çevrilmişdir. Qeyd edək ki,

belə ifratnəhənglərə bəzən post-AGB (Nəhənglərin Asimptotik Qolu) tipli ulduzlar da deyilir.

Ona görə də yüksək enlikdə yerləşən HD161796 ulduzunun tədqiqi təkamül nəzəriyyəsinə görə mühüm əhəmiyyət kəsb edir.

HD161796=V814Her ifratnəhəng ulduzunun spektral sinfi F3Ib, görünən ulduz ölçüsü $m_V=7^m.01$, mütləq ulduz ölçüsü isə müxtəlif müəlliflər tərəfindən $M=-6^m.3 \div -9^m$ intervalında qiymətləndirilir Bartkevicius [2]. Qalaktika müstəvisindən xeyli uzaqda, $z=3.9$ kpc məsafədə və yüksək enlikdə yerləşən bu ulduzun Qalaktik kordinatları belədir: qalaktik enlik $b = +30^\circ.66$, qalaktik uzunluq $l=77^\circ.13$. Kipper [3] yüksək dispersiyali CCD spektrlərinə əsasən bu ulduzun fundamental parametrləri üçün $T_{\text{eff}}=7250 \pm 200$ K, $\log g=0.5 \pm 0.3$ qiymətini almışdır. Molina [4] isə $T_{\text{eff}}=6666 \pm 500$ K, $\log g=0.7 \pm 0.3$. Ferro [5] uvbyβ fotometrik sisteminə əsasən $T_{\text{eff}}=6850$ K, $\log g=0.37$ qiymətini tapmışdır. Göründüyü kimi HD161796 ulduzunun effektiv temperaturu və səthində ağırlıq qüvvəsi təcili üçün müxtəlif müəlliflər müxtəlif qiymətlər almışlar. Ona görə də bu ulduzun fundamental parametrlərinin yenidən təyin olunması xüsusi əhəmiyyət kəsb edir.

MÜŞAHİDƏ MATERİALLARININ ALINMASI VƏ İSLƏNMƏSİ

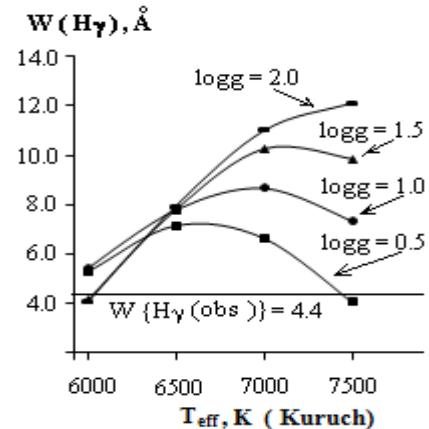
HD161796 ulduzunun spektrleri 17-18.08.2004-cü il tarixlərində N.Tusi adına Şamaxı Astrofizika Rəsədxanasının 2 metrlik teleskopunun kasseqren fokusunda quraşdırılmış CCD kamerası ilə alınmışdır Mikailov [12]. Müşahidə materialları $\lambda\lambda 3960$ - 6600\AA spektral oblastını əhatə edir. Bu oblast üçün bir gecədə ulduzun 3 spektri alınmışdır. Gecə ərzində ulduzun spektrində güclü dəyişkənlik olmadığı üçün spektrler ortalaşdırılmışdır. H_{α} oblastında dispersiya $10.5\text{\AA}/\text{mm}$, H_{γ} oblastında isə $6\text{\AA}/\text{mm}$ -dir. Spektral ayırdetmə $R=14000$, və $S/N=150\div200$ -dir. Spektrlerin işlənməsi [6] tərəfindən təqdim olunmuş DECH-20 və DECH-20T paket programları vasitəsilə aparılmışdır. Ekvivalent enin ölçülümsindəki xəta 10%-dən çox deyildir.

EFFEKTİV TEMPERATUR VƏ AĞIRLIQ QÜVVƏSİ TƏCİLİNİN TƏYİNİ

HD 161796 ulduzunun effektiv temperaturu (T_{eff}) və səthində ağırlıq qüvvəsi təcili (log g) təyin olunması ulduzun bir sıra spektral və fotometrik kəmiyyətlərinin müşahidədən ölçülmüş və nəzəri hesablanmış qiymətlərinin müqayisəsinə əsaslanır. İsdə, həmçinin, parallaksın qiymətindən də istifadə olunması dəqiqliyi bir qədər də artırır. Effektiv temperatur və ağırlıq qüvvəsi təcili aşağıdakı meyarlardan istifadə edilərək təyin olunmuşdur:

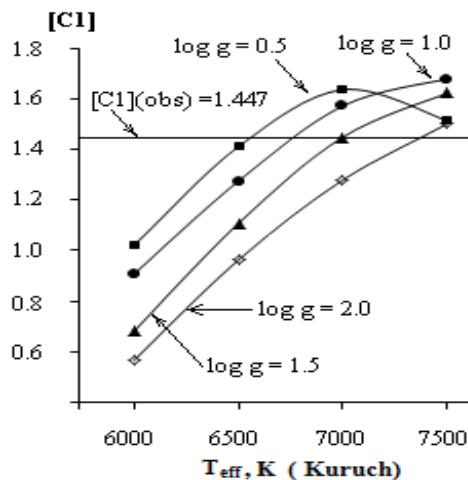
1. Hidrogenin Balmer seriyasının H_{γ} xəttinin ekvivalent eninin nəzəri hesablanmış və müşahidədən tapılmış qiymətlərinin müqayisəsi. Müşahidədən H_{γ} xəttinin ekvivalent eni üçün $W(H_{\gamma})=4.356\text{\AA}$ qiyməti alınmışdır.
2. $[c_1]$ indeksinin müşahidədən tapılmış və nəzəri hesablanmış qiymətlərinin müqayisəsi. Dörd rəngli, orta zolaqlı uvby fotometrik sistemində $[c_1]$ indeksi $[c_1]=c_1-0.2(b-y)$ düsturu ilə təyin edilir. Bu kəmiyyət ulduzlararası fəzada udulmanın təsirindən azaddır. Ona görə də model üsulu ilə ulduzun fundamental parametrlərini təyin etdikdə bu kəmiyyətdən istifadə olunması məqsədə uyğundur. Müşahidədən bu kəmiyyət üçün $[c_1]=1.447$ qiyməti alınmışdır [5].

3. Q indeksinin müşahidə və nəzəri hesablanmış qiymətlərinin müqayisəsi. Q indeksi UVB fotometrik sistemində təyin olunur: $Q=(U-B)-0.72(B-V)$. Q kəmiyyəti də $[c_1]$ kimi ulduzlararası fəzada udulmanın təsirindən azad olduğu üçün çox əhəmiyyətlidir. Müşahidədən bu kəmiyyət üçün $(U-B)=0.32$, $(B-V)=0.47$, $Q=-0.0184$ qiyməti alınmışdır [7].



Şəkil 1

$W_{\gamma}-T_{\text{eff}}$ diaqramı, W_{γ} (müş)=4.4,
log g=0.5; 1.0; 1.5 və 2.0.

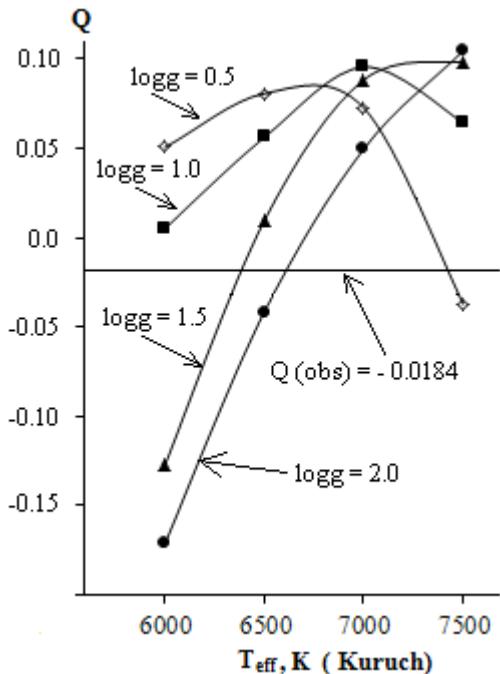


Şəkil 2

$[c_1]$ – T_{eff} diaqramı. log g = 0.5; 1.0; 1.5 və 2.0,
 $[c_1]$ (müş)=1.447.

Bu diaqrlamlarda uyğun olaraq müşahidədən tapılmış $W(H_{\gamma})=4.356\text{\AA}$, $[c_1]=1.447$ və $Q=-0.0184$ düz xətti keçirilir. Sonra isə hər bir diaqramda kəsişmə nöqtələrinə uyğun ($\log g$, T_{eff}) cütürləri təyin olunur. Bu cütürlər $\log g-T_{\text{eff}}$ diaqramında qeyd olunur və ulduzun temperaturunun və səthində

ağırlıq qüvvəsi təciliinin tapılması istifadə olunur (Şəkil 5).



Şəkil 3

$Q - T_{\text{eff}}$ diaqramı. $\log g = 0.5; 1.0; 1.5 \text{ və } 2.0$, Q (müs) = -0.0184.

4. Parallaksın tətbiqi üsulu. Bu üsul ulduz atmosferi modelləri ilə bağlı olmayan və ulduzların fundamental parametrlərinin ($\log g, T_{\text{eff}}$) təyinində yeni hesab olunan üsuldur. Əvvəllər tətbiq olunan standart üsullardan fərqli olaraq bu üsul $\log g$ -nin təyin olunmasında dəqiqliyi artırmağa imkan verir.

Aşağıdakı məlum ifadələrdən istifadə edilir:

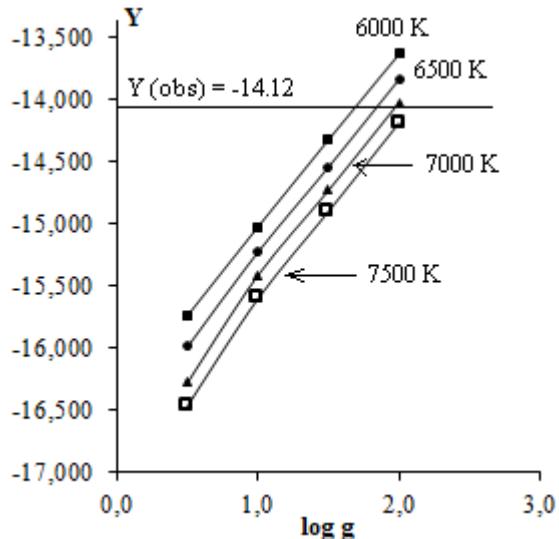
$$\log d = -5.25 + 0.5 \log M/M_{\odot} + 2 \lg T_{\text{eff}} - 0.5 \log g + 0.2 m_v - 0.2 A_v + 0.2 BC \quad (1)$$

Burada d - ulduza qədər məsafə (ps), M/M_{\odot} - ulduzun kütləsinin Güneş kütləsi ilə ifadəsi, m_v - görünən ulduz ölçüsü, A_v - ulduzlararası fəzada udulma, BC - bolometrik düzəlişdir. $d=1/\pi''$ olduğunu nəzərə alaraq bu ifadəni aşağıdakı kimi yazımaq olar:

$$\log g - \log M/M_{\odot} - 0.4 BC - 4 \log T_{\text{eff}} = -10.50 + 2 \log \pi'' + 0.4 m_v - 0.4 A_v \quad (2)$$

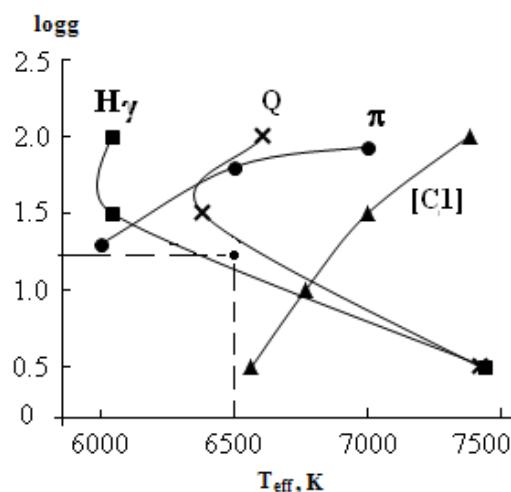
Bərabərliyin sağ tərəfinə daxil olan kəmiyyətlər müşahidədən məlumdur: $\pi''=0.00071$

[9], $m_v=7^m.2$, $E(b-v)=0.16$, $A_v=3.2$ $E(b-v)=0^m.512$ [10]. Bu verilənlərdən istifadə etsək, (2) ifadəsinin sağ tərəfi üçün $C=-14.1228$ qiymətini alıq. (2) ifadəsinin sol tərəfində isə (Y) məchul kəmiyyətdir, bura T_{eff} , $\log g$ və bu kəmiyyətlərlə bağlı M/M_{\odot} və BC kəmiyyətləri daxildir. (2) tənliyini həll etmək üçün M/M_{\odot} qiymətini bilməliyik. Bu qiymət nəzəri təkamül əyrilərinin köməyi ilə tapılır [11].



Şəkil 4

$Y - \log g$ diaqramı, Y (müs) = -14.1228.



Şəkil 5

$\log g - T_{\text{eff}}$ diaqramı.

Məlumdur ki, hər bir təkamül əyrisinə müəyyən M/M_{\odot} kəmiyyəti uyğundur. Kuruç modellərindən uyğun BC-ləri götürərək bərabərliyin sol tərəfinin (Y-in) müxtəlif T_{eff} -lər üçün $\log g$ -dən

asılılıq qrafiki qurulur və $C=14.1228$ düz xətti çəkilir (Şəkil 4). Kəsişmə nöqtələrinə uyğun ($\log g, T_{\text{eff}}$) cütləri təyin olunur. Bu cütlər $\log g-T_{\text{eff}}$ diaqramında qeyd olunur (Şəkil 5).

Yuxarıda qeyd olunan üsullarla təyin olunmuş $\log g-T_{\text{eff}}$ cütləri əsasında $\log g-T_{\text{eff}}$ müstəvi-sində onların müxtəlif kombinasiyalarına uyğun qrafiklər qurulur (Şəkil 5). Qrafikdə hər bir əyri $\log g-T_{\text{eff}}$ diaqramında müqayisə olunan fiziki kəmiyyətlərin müşahidə və nəzəri qiymətlərinin üstünlüyü nöqtələrin həndəsi yeridir. Qeyd edək ki, $T_{\text{eff}} (T_{\text{eff}}=6000\text{K}, 6500\text{K} \text{ və } 7000\text{K})$ və $\log g (log g=0.5 \div 2.0)$ verilən qiymətlər diapazonu ulduzun spektral və işıqlıq siniflərinə uyğun gələn qiymətlərdir. $Q, [c_1], W(H_{\gamma})$ kəmiyyətlərinin müşahidə və nəzəri hesablanmış qiymətlərinin müqayisəsi və parallaksın tətbiqinə əsasən qurulan $T_{\text{eff}}-\log g$ diaqramında qeyd olunan qrafiklər kəsişir. $T_{\text{eff}}-\log g$ diaqramında kəsişmə nöqtələrinin həndəsi mərkəzinə əsasən ulduzun effektiv temperaturu və səthində ağırlıq qüvvəsinin təcili təyin edilir: $T_{\text{eff}}=6680 \pm 200\text{K}$, $\log g=1.8 \pm 0.2$.

Müqayisə üçün Cədvəl 1-də digər müəlliflərin aldiqları nəticələr göstərilmişdir. Göründüyü kimi bizim tərəfimizdən effektiv temperatur üçün alınan qiymət [4]-ün aldığı nəticə ilə uyğunluq təşkil edir. Sərbəstdüşmə təcili üçün aldığımız qiymət isə digər müəlliflərin aldığı

qiymətlərdən fərqlidir.

Cədvəl 1

Effektiv temperatur və sərbəstdüşmə təcili üçün müxtəlif müəlliflərin aldığı nəticələr.

T_{eff}, K	$\log g$	Müəlliflər
7250 ± 200	0.5 ± 0.3	Kipper [3]
6666 ± 500	0.7 ± 0.3	Molina[4]
6850	0.37	Ferro, [5]
6680 ± 200	1.8 ± 0.2	Bizim nəticələr

ƏSAS NƏTİCƏLƏR

Ulduz atmosferini xarakterizə edən $[c_1]=c_1-0.2(b-y)$, $Q=(U-B)-0.72(B-V)$ fotometrik parametrlərinin hidrogenin Balmer seriyasının H_{γ} xəttinin ekvivalent eninin müşahidədən tapılmış, eləcə də Kuruc [8] tərəfindən nəzəri hesablanmış qiymətlərinin müqayisəsi və həmçinin parallaksın qiymətindən istifadə etməklə HD161796 ulduzunun effektiv temperaturu və səthində ağırlıq qüvvəsinin təcili təyin edilmişdir:

$$T_{\text{eff}}=6500 \pm 200\text{K}, \log g=1.2 \pm 0.2.$$

Alınmış nəticələrdən gələcəkdə ulduzun kimyəvi tərkibinin öyrənilməsində və nəzəri modelinin qurulmasında istifadə etmək olar.

1. W.P.Bidelman. *Spectral Classification of Stars Listed in Miss Payne's Catalogue of C Stars*, *Astrophysical Journal*, **113** (1951) 304-308.
2. A.Bartkevicius. *Catalogue of Population II A-F supergiants - UU Herculis and related stars*, *Baltic Astronomy*, **1** (1992), pp.194-215.
3. T.Kipper. *Optical Spectrometry of the Post-Agb Star HD 161796*, *Baltic Astronomy*, **16** (2000) 191-198.
4. R.E.Molina. *An approach to effective temperature and surface gravity in post-AGB and RV Tauri stars in the near-IR region*, *Revista Mexicana de Astronomía y Astrofísica*, **48** (2012), pp.95-107.
5. A.A.Ferro. *Functional relationships for T_{eff} and $\log g$ in F-G supergiants from uvby-beta photometry*, *Revista Mexicana de Astronomía y Astrofísica*, **46** (2010) 331-338.
6. А.Г.Галазутдинов. *Система обработки Эшелле-спектров DECH20*, Препринт CAO, № 92 (1992).
7. J.D.Fernie. *New UBVR photometry for 900 supergiants*, *Astrophysical Journal Supplement Series*, **52** (1983) 7-22.
8. L.S.Kurucz. CD-ROM, № 13 (2004).
9. F.Leeuwen. *Validation of the new Hipparcos reduction*, *Astronomy and Astrophysics*, **474** (2007) 653-664.
10. J.D.Fernie. *Photometric Data for 139 Supergiants*, *The Astronomical Journal*, **77** (1972) 150-151.
11. A.Claret. *New grids of stellar models including tidal-evolution constants up to carbon burning. I. From 0.8 to 125 M_{\odot} at Z=0.02*, *Astronomy and Astrophysics*, **424** (2004) 919-925.
12. X.M.Микаилов, B.M.Халилов, I.A.Алекберов. Эшелле – спектрометр фокуса кассегренна 2-х метрового телескопа ИЛАО НАН Азербайджана, *ŞAR Sirkulyarı*, №109 (2005) 21-29.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АТМОСФЕРНЫХ ПАРАМЕТРОВ ЗВЕЗДЫ HD 161796 (F3 Ib)

А.Р.ГАСАНОВА, А.М.ХАЛИЛОВ, Г.М.ГАДЖИЕВА

На основе спектрограмм, полученных на 2-м телескопе Шамахинской Астрофизической Обсерватории (ШАО), исследованы звезды HD161796. Используя сравнение наблюдательных и теоретических данных, некоторых спектральных и фотометрических параметров, характеризующих атмосферу звезды, а также применяя величину параллакса, определили эффективную температуру и ускорение силы тяжести этой звезды: $T_{\text{eff}}=6680 \pm 200\text{K}$, $\log g=1.8 \pm 0.2$.

DETERMINATION OF ATMOSPHERIC PARAMETERS OF STAR HD 161796 (F3 Ib)

A.R.HASANOVA, A.M.KHALILOV, G.M.HAJIYEVA

Star HD161796 has been investigated on the basis of the spectrograms Shamakhy Astrophysical Observatory (ShAO). The effective temperature and surface gravity of this star as well: $T_{\text{eff}}=6680 \pm 200\text{K}$, $\log g=1.8 \pm 0$ have been determined using comparison of the observational and theoretical given, some spectral and photometric parameters characterizing atmospheres of the star, and application of a method of a parallax.

Редактор: к.ф-м. н. Б.Рустамов

UOT.524

HD188001 VƏ HD178129 İFRATNƏHƏNG ULDUZLARININ TƏDQİQİ

Y.M.MƏHƏRRƏMOV

AMEA N.Tusi adına Şamaxı Astrofizika Rəsədxanası

AZ5626, Şamaxı r., Y.Məmmədəliyev qəs.

y_mehlerremov@rambler.ru

Daxil olub: 18.05.2015

Çapa verilib: 22.06.2015

REFERAT

Bu işdə HD188001 və HD178129 ifratnəhəng ulduzları haqqında qısa məlumatlar və onların ŞAR-da 2014-cü ildə alınmış spektrlərində maraqlı xüsusiyyətlər təqdim olunur. Aşkar olunmuşdur ki, tədqiq olunan ulduzların spektrlərində H_α xəttinin profilinin strukturu qısa zamanda dəyişir. Bundan əlavə, bu ulduzların spektrlərində H_α , H_β və HeI xətləri tədqiq edilərkən müəyyən edilmişdir ki, bu xətlərdə şüa sürəti və spektral parametrlərin qiymətləri güclü dəyişkənliliyə malikdir.

Açar sözlər: İfratnəhəng, H_α xəttinin profili, şüa sürəti, spektral parametrlər.

GİRİŞ

Müxtəlif tədqiqatçılar tərəfindən HD188001 (9 Sge) və HD178129 (V^{*}1403 Aql) ifratnəhəng ulduzlarının spektral sinfi, görünən ulduz ölçüsü (m_v), mütləq ulduz ölçüsü (M_v), kütlə mərkəzinin şüa sürəti (V_r), firlanma sürəti ($\vartheta \sin i$), il ərzində kütlə itgisi (M) və digər fiziki parametrlər təyin olunmuşdur [1-18].

Hutchings, Snow, Morton, Abbott, Lamers, Nerney, Ebbets, Wilson, Dopita, Gies, Leitherer, Tarafdar, Scuderi, Underhill, Matthews, Massa, Prinja, Peri, Aslanov, Barannikov, Hobbs, Albert, Balona, Gammelgaard, Megessier və başqaları öz işlərində HD188001 və HD178129 ifratnəhəng ulduzlarının fotometrik və spektral tədqiqi, habelə onların fiziki parametrlərinin təyini ilə məşğul olmuşlar.

HD188001. SAO/NASA ADS sistemində bu ulduzun öyrənilməsinə dair ümumilikdə 300-ə yaxın elmi məqalə vardır. Aparılmış tədqiqatlar zamanı müəyyən edilmişdir ki, bu ulduz O7.5Iab spektral və işıqlıq sinfinə mənsub $m_v=6.25$, $M_v=-6.6$ olan ulduzdur [6,8,13]. Son məlumatlara görə bu ulduzun kütlə mərkəzinin sürəti $V_r=13.6\text{km/s}$, səthində ağırlıq qüvvəsinin təcili $\log g=3.36$,

effektiv temperaturu $T_{\text{eff}}=34080\text{K}$, kütləsi $M/M_\odot=63$, radiusu $R/R_\odot=27$, işıqlığı $\log L/L_\odot=5.86$, kütlə itgisi $M=0.5\times 10^6 M_\odot/\text{il}$, firlanma sürəti $\vartheta \sin i=94\text{km/s}$, ulduza qədər məsafə $d=2200\text{ pc}$ -dir [1-18]. Bundan əlavə, fotometrik tədqiqatlar zamanı $B-V=0.01$, $U-B=-0.92$, $E(B-V)=0.32\pm 0.05$ qiymətləri təqdim edilmişdir [8, 16].

Lakin, qeyd olunan tədqiqatçıların işlərini araşdırarkən məlum olur ki, ulduz atmosferini xarakterizə edən fiziki parametrlərin qiymətlərində nəzərəçarpacaq dərəcədə fərqli nəticələr alınmışdır. Bu da onu göstərir ki, həmin fiziki parametrlər ya sabit deyil, ya da onların təqdiməsi üçün tətbiq olunan nəzəri modellərdə və digər hesablamalarda müəyyən xətalar vardır. Ona görə də çoxsaylı müxtəlif nəticələr alınmışdır.

HD188001 ulduzunun atmosferini xarakterizə edən fiziki parametrlər üçün digər müəlliflərin aldığı nəticələr əsasən aşağıdakılardan ibarətdir:

Spektral sinfi O7.5Ia, O7.5Iabf, O7.5Iaf, O8I, O8If; kütlə mərkəzinin şüa sürəti $V_r=15.5\text{km/s}$, effektiv temperaturu $T_{\text{eff}}=33000\text{K}$, $\log T_{\text{eff}}=4.545$, $\log T_{\text{eff}}=4.519$, $\log T_{\text{eff}}=4.49$, $T_{\text{eff}}=35000\text{K}$, $T_{\text{eff}}=34200\text{K}$, $T_{\text{eff}}=34400\text{K}$; kütləsi $M/M_\odot=46, 49, 50, 53, 61$; radiusu $R/R_\odot=20.5, 23.1, 24, 26, 29$; işıqlığı $\log L/L_\odot=5.76, 5.90$;

firlanma sürəti $g_sini=88\text{km/s}$, 93km/s , 110km/s , ulduza qədər məsafə $d=2400\text{pc}$, 3150 pc , 3200 pc və s [1-18].

Yuxarıda qeyd olunanlardan əlavə, Conti və Leep [26] göstərmışlər ki, HD188001 ulduzunun spektrlərində H_α xətti udulma komponenti zəif olan P Cyg tipli profildir. Müəlliflər bir neçə xətləri eyniləşdirərək qeyd etmişlər ki, spektrlərdə $\text{HeI } \lambda 5876$, $\text{HeI } \lambda 6678$, $\text{HeII } \lambda 4686$ və $\text{NIII } \lambda 4640$ xətləri udulma, $\text{CIII } \lambda 5696$ xətti isə şüalanma komponenti formasında müşahidə olunur [26].

Giesin [8] işində qeyd olunmuşdur ki, HD188001 tək ulduzdur. Ulduzun atmosferində şüa sürətinin qiymətində güclü dəyişmələr aşkar olunmuşdur. Belə ki, atmosferin ulduz küləyinin formalaşlığı yuxarı qatlarında yaranan H_α , H_β və $\text{HeI } \lambda 5876$ xətlərində, şüa sürətinin qiymətində qısamüddətli dəyişmələr müşahidə olunmuşdur [8].

Underhill [20] bir neçə xətti eyniləşdirərək H_α , H_β , H_γ , $\text{HeI } (\lambda 5875.62, \lambda 6678.15)$, $\text{HeII } (\lambda 4685.68, \lambda 5411.52)$, $\text{NIII } (\lambda 5320.82, \lambda 5327.18)$, $\text{CIII } (5695.92)$, $\text{CIV } (\lambda 5801.33, \lambda 5811.98)$, $\text{SiIV } (\lambda 4654.32, \lambda 6667.56, \lambda 6701.21)$ xətlərində şüa sürətində baş verən dəyişmələri tədqiq etmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, H_α , $\text{HeII } (\lambda 4685.68)$, $\text{NIII } (\lambda 5320.82, \lambda 5327.18)$ və $\text{CIII } (\lambda 5695.92)$ xətləri şüalanma komponenti formasında, qalanları isə udulmada müşahidə olunur. Tədqiq edilən H_α və $\text{HeII } (\lambda 4685.68)$ xətlərinin şüalanma komponentləri zamana görə daha çox dəyişir [19].

Underhill və Matthews bu ulduz üçün 78.74 günlük spektroskopik dəyişmə periodu tapmışlar [20]. Onlar fərzi edirlər ki, bu ulduzun ətrafında təxminən $1.2 \div 1.9 M_\odot$ kütləyə malik ikinci komponent vardır. Eyni nəticəyə Aslanov və başqalarının, Aslanov və Barranikovun işlərində də rast gəlinir [25, 27]. Bu və digər işlərdə uyğun olaraq 32.514 və 78.3 günlük spektroskopik dəyişmə periodları təpılmış və HD188001 tutulan qoşa ulduz hesab edilmişdir [21, 24]. Bundan əlavə, Underhill öz tədqiqatlarında müəyyən etmişdir ki, bu ulduzun spektrlərində NaI D1, D2 xətlərində şüa sürəti - $6\text{km/s} \div 6\text{ km/s}$ intervalında dəyişir [22].

Bagnuolo və Barry HD188001 ulduzu spektrlərində $\text{OIII } (\lambda 5592)$, $\text{CIII } (\lambda 5696)$, $\text{CIV } (\lambda 5801,$

$\lambda 5812)$ xətlərini eyniləşdirmiş və bu xətlərdə ekvivalent enin dəyişmələrini tədqiq etmişdir [23].

HD178129. SAO/NASA ADS sistemində bu ulduzun öyrənilməsinə dair ümumilikdə 15-ə yaxın elmi məqalə vardır. İstər fiziki parametrlərinin təyini, istərsə də fotometrik və spektral tədqiqatlar baxımından HD178129 ulduzu olduqca az öyrənilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, HD178129 ulduzunun spektral və işıqlıq sinfi B3Ia, görünən və mütləq ulduz ölçüləri uyğun olaraq $m_v=7.41$ və $M_v=-6.1$, kütlə itgisi $M=4 \cdot 10^6 M_\odot/\text{il}$, ulduza qədər məsafə $d=2900\text{pc}$, ulduzun kütlə mərkəzinin şüa sürəti $V_r=33.2\text{ km/s}$ və $E(B-V)=0.63$ -dür [3, 18].

Bundan əlavə, Hobbs bu ulduzun spektrlərində $\text{NeI } (\lambda 6382.99)$ və $\text{Si II } (\lambda 6371.36)$ xətlərində ekvivalent enin dəyişmələrini tədqiq etmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, Si II xəttində $W=(240 \pm 13)\text{m}\AA$, NeI xəttində isə $W=(18 \pm 13)\text{m}\AA$ intervalında dəyişir [28].

Hutchings [29] tədqiqatlarında HD178129 ulduzu da daxil olmaqla bir çox parlaq ulduzlarda kütlə itgisi və ulduz küləyinin xarakterini öyrənmək məqsədilə onların spektrlərində H_β , HeI , $\text{Mg II } (\lambda 4481)$, SiII , CII , H_γ , Si III , OII , NII və başqa xətlərdə şüa sürətlərinin dəyişmələrini tədqiq etmişdir. Qeyd olunur ki, alınmış bu nəticələrdən gələcəkdə belə parlaq ulduzların öyrənilməsində geniş istifadə oluna bilər.

Megessier [30] HD178129 ifratnəhəng ulduzu üçün 7 günlük yarım-periodik fotometrik dəyişkənlik aşkar etmişdir.

Beləliklə, HD188001 və HD178129 ifratnəhəng ulduzlarının tədqiqinə dair indiyədək nəşr olunmuş elmi məqalələrin təhlili göstərir ki, onların spektrlərində müşahidə olunan xətlərin tədqiqinə aid məlumatlar çox azdır. Həmin ulduzlar O və B siniflərinə mənsub isti ifratnəhənglərdir.

İşin əsas məqsədi – tədqiq olunan ulduzların Şamaxı Astrofizika Rəsədxanasının 2 metrlik teleskopunda alınmış spektrlərində seçilmiş xətlərin profilərinin quruluşu, bu xətlərdə şüa sürəti və spektral parametrləri müqayisəli şəkildə analiz etməkdən ibarətdir.

Hesab edirik ki, alınmış nəticələr tədqiq olunan ulduzların atmosferlərində gedən proseslərin öyrənilməsində əhəmiyyətli baza rolunu oynaya bilər.

MÜŞAHİDƏ MATERİALLARININ ALINMASI, İŞLƏNMƏSİ VƏ MÜZAKİRƏSİ

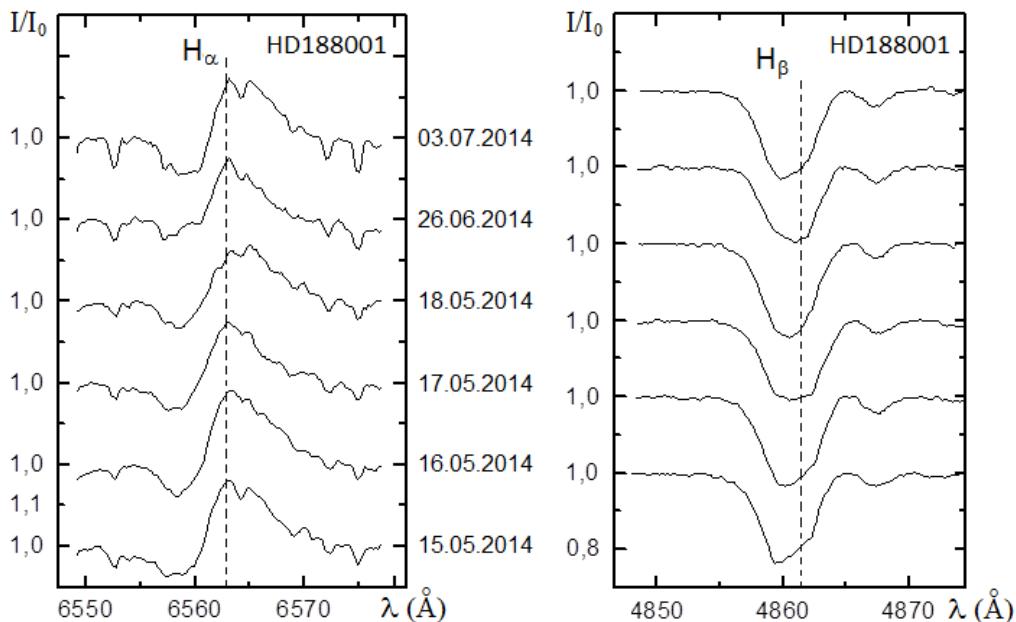
Spektroskopik tədqiqatlar baxımından maraq doğurduğuna görə ilk dəfə olaraq 2014-cü ildə N.Tusi adına Şamaxı Astrofizika Rəsədxanasının 2 metrlik teleskopunda HD188001 və HD178129 ulduzlarının spektral müşahidələri aparıldı [31]. Bütün spektrlər Dech-20 və Dech-20t paket programları vasitəsilə işlənmişdir [32]. S/N=150÷200, ölçmələrin xətası şüa sürəti üçün $\pm 2\text{km/san}$, ekvivalent en üçün isə 5%-dən çox deyil.

İşdə müşahidə materialları əsasında aşkar edilmişdir ki, tədqiq olunan ulduzların spektrlərində H_α və H_β xətlərinin profilləri həm quruluş cəhətdən, həm də şüa sürəti və spektral parametrlərin qiymətləri baxımından kəskin dəyişkənliliyə malikdir. Bunu müəyyən etmək üçün aşağıdakı müşahidə faktlarına diqqət yetirək. Qeyd edək ki, xətlərin profilləri dalğa uzunluğunda verilərkən Günəşin uyğun heliosentrik sürəti (V_a) nəzərə alınmışdır.

HD188001. Bu ulduzun spektrləri işlənərkən məlum oldu ki, bəzi xətlərin profilinin quruluşunda, o cümlədən şüa sürəti və atmosfer paramet-

rlərinin qiymətlərində dəyişkənlilik baş verir. ŞAR-in 2 metrlik teleskopunda HD188001 ulduzunun 6 günlük spektri alınmışdır.

Şəkil.1-də HD188001 ulduzunda H_α və H_β xətlərinin profilləri verilmişdir. Şəkil.1 və Cədvəl.1-dən görünür ki, hidrogenin Balmer seriyası üzrə H_α və H_β xətlərində dəyişmələr baş verir. H_α xətti çox-komponentli profildən ibarətdir. Şüa sürətinin ölçmələri göstərir ki, xəttin konturunun udulma və şüalanma hissəsində yaranmış kiçik komponentlər bənövşəyi və qırmızı tərəflərə doğru rəqsli hərəkətlər edir. Müşahidə materialları az olsa da bu prosesi diqqətlə izləsək müəyyən olunur ki, həmin komponentlər xəttin konturu üzərində rəqsli hərəkətlər etsələr də hərəkətin ümumi istiqaməti bənövşəyi tərəfə doğru yönəlmışdır. 26.06.2014 tarixli spektrdən görünür ki, H_α xəttinin udulma komponentinin qırmızı tərəfində üçüncü yeni kiçik komponent yaranmış ($V_r=-103\text{km/s}$) və növbəti 03.07.2014-cü il tarixdə o da bənövşəyi tərəfə ($V_r=-111\text{km/s}$) sürüşməşdir. Bundan əlavə, xəttin ekvivalent eni, yarımeni və mərkəzi intensivliyinin dəyişmələri də baş verir. Lakin bu dəyişmələr arasında korrelyasiya müəyyən edilməmişdir.



Şəkil.1
HD188001 ulduzu spektrlərində H_α və H_β xətlərinin profilləri

Cədvəl 1

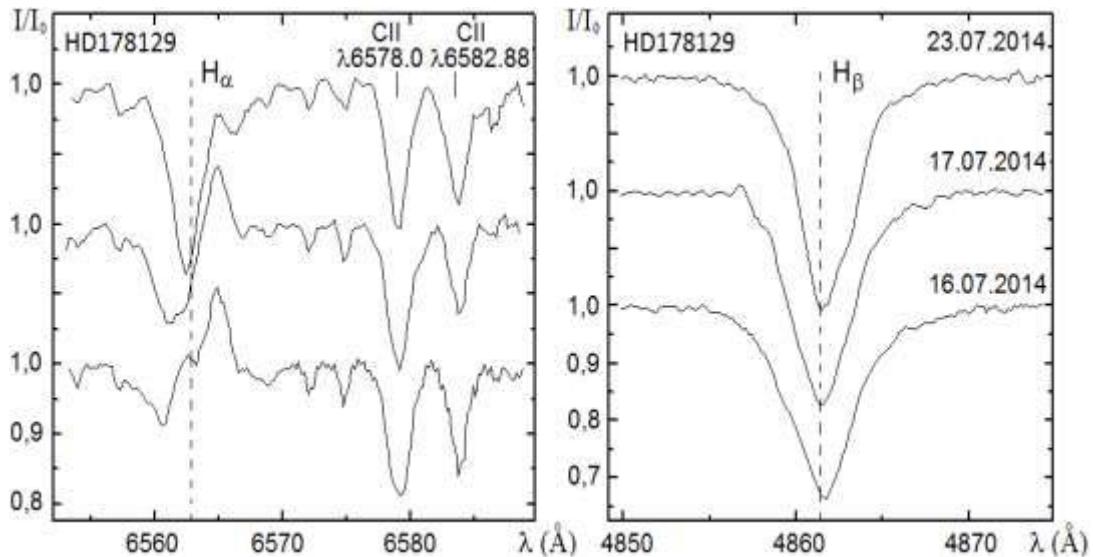
H_α , HeI, NaI və H_β xətlərində şúa sürəti və spektral parametrlərin qiymətləri

Tarix	HD188001 (9S ge)											
	H_α											
	Vr(1) abs. km/s	Vr(2) abs. km/s	r _v (1) abs.	r _v (2) abs.	$\Delta\lambda_{1/2}$ abs. Å	W _λ abs. Å	Vr(1) em. km/s	Vr(2) em. km/s	r _v (1) em.	r _v (2) em.	$\Delta\lambda_{1/2}$ em. Å	W _λ em. Å
15.05.2014	-225	-161	0.93	0.93	4.7	0.34	33	118	1.16	1.14	5.9	0.92
16.05.2014	-224	-182	0.94	0.92	3.0	0.24	43	110	1.18	1.16	6.3	1.07
17.05.2014	-214	-166	0.93	0.94	3.1	0.26	28	112	1.15	1.13	4.6	0.77
18.05.2014	-229	-184	0.95	0.94	3.2	0.20	44	122	1.12	1.14	6.4	0.79
26.06.2014	-245 -103	-204	0.95	0.96	2.0	0.11	22	97	1.15	1.11	4.7	0.61
03.07.2014	-247 -111	-189	0.93	0.91	4.0	0.35	19	106	1.15	1.14	5.5	0.75
Tarix	HD188001 (9S ge)											
	HeI 5875.62				NaID1		NaID2		H_β			
	V _r km/s	r _v	$\Delta\lambda_{1/2}$ Å	W _λ Å	V _r km/s	V _r km/s	V _r km/s	r _v	$\Delta\lambda_{1/2}$ Å	W _λ Å		
15.05.2014	-6	0.70	4.2	1.47	2	0	-98	0.76	4.7	1.15		
16.05.2014	13	0.69	4.0	1.40	6	5	-54	0.77	5.0	1.17		
17.05.2014	17	0.69	3.7	1.40	2	1	-25	0.79	5.2	1.14		
18.05.2014	-1	0.66	3.7	1.42	4	3	-29	0.76	4.7	1.19		
26.06.2014	14	0.71	3.3	1.08	-3	-4	-10	0.80	4.7	0.93		
03.07.2014	-7	0.68	3.6	1.29	-5	-5	-84	0.77	4.7	1.12		

H_β xəttinin profillərində isə - onun nüvə hissəsi (aşağı pik) gah bənövşəyi, gah da qırmızı tərəfə əyilmiş formalarda, o cümlədən simmetrik formada müşahidə olunur. Yəni, əksər hallarda asimmetriyanın olduğu tam aşkardır. Qeyd edək ki, H_β xəttinin profilində də çox kiçik komponentlər vardır, lakin ayırdetmə aşağı olduğuna görə onların xarakterik xüsusiyyətlərini müəyyən etmək mümkün deyil. Şəkil 3-dən göründüyü kimi HeI və H_β xətləri profillərinin quruluşunda nəzərəçarpacəq dəyişmələr yoxdur. Cədvəl 1-dəki ölçmələrdən gorunur ki, NaI dubletində şúa sürəti $-5 \div 6$ km/s intervalında dəyişir. HeI və H_β xətlərində isə qalıq intensivliyi, xəttin yarımeni və ekvivalent eni uyğun olaraq $0.66 \div 0.71$, $3.3 \text{ Å} \div 4.2 \text{ Å}$, $1.08 \text{ Å} \div 1.47 \text{ Å}$ və $0.76 \div 0.80$, $4.7 \text{ Å} \div 5.2 \text{ Å}$, $0.93 \text{ Å} \div 1.19 \text{ Å}$ intervallarında dəyişir. Göründüyü kimi bu dəyişmələrdə kəskin fərq yoxdur. Lakin HeI və H_β xətlərində şúa sürətində güclü dəyişmələr vardır. Cədvəl 1-dən məlum olur ki, HeI və H_β xətlərində şúa sürəti uyğun olaraq $-7 \div 17$ km/s və $-98 \div -10$ km/s intervallarında dəyişir. Müşahidə tarixlərini izləsək aydın olur ki, şúa sürəti bir gün ərzində HeI xəttində $15 \div 19$ km/s, H_β xəttində isə 44 km/s qədər dəyişmişdir.

HD178129. ŞAR-in 2 metrlik teleskopunda HD178129 ulduzunun 3 gecədə alınmış spektrləri tədqiq edilmişdir. Bu ulduzun spektrində müşahidə olunan spektral xətlərin parametrlərinin çox qısa zaman intervalında spektral dəyişkənlilik göstərməsi müəyyən edilmişdir.

Şəkil 2-də HD178129 ulduzunda H_α və H_β xətlərinin profilləri verilmişdir. Şəkil 2 və Cədvəl 2-dən görünür ki, H_α və H_β xətlərində maraqlı dəyişmələr baş verir. Bəzən H_α xəttinin şüalanma komponentindən qırmızı tərəfdə də zəif udulma komponenti müşahidə olunur. Qeyd edək ki, H_α xətti əvvəlcə hər iki qanadında udulma olan mərkəzi şüalanma komponenti formasında, sonra normal P Cyg profil, daha sonra isə tam udulma komponenti formasında müşahidə olunmuşdur. Dəyişməni izləsək aydın olur ki, əvvəlcə udulma komponentinin dərinliyi az olmuş, sonra bu dərinlik artmağa başlamış və eyni zamanda orada ikinci zəif komponent də yaranmışdır. Daha sonra isə xəttin dərinliyi yenidən artmış və bu zaman şüalanma komponenti tamamilə itmişdir. Xəttin konturnun belə dəyişməsinə səbəb tədqiq olunan ulduzda Megessier [30] qeyd etdiyi kimi 7 günlük yarım-periodik fotometrik dəyişkənlilik də səbəb ola bilər.

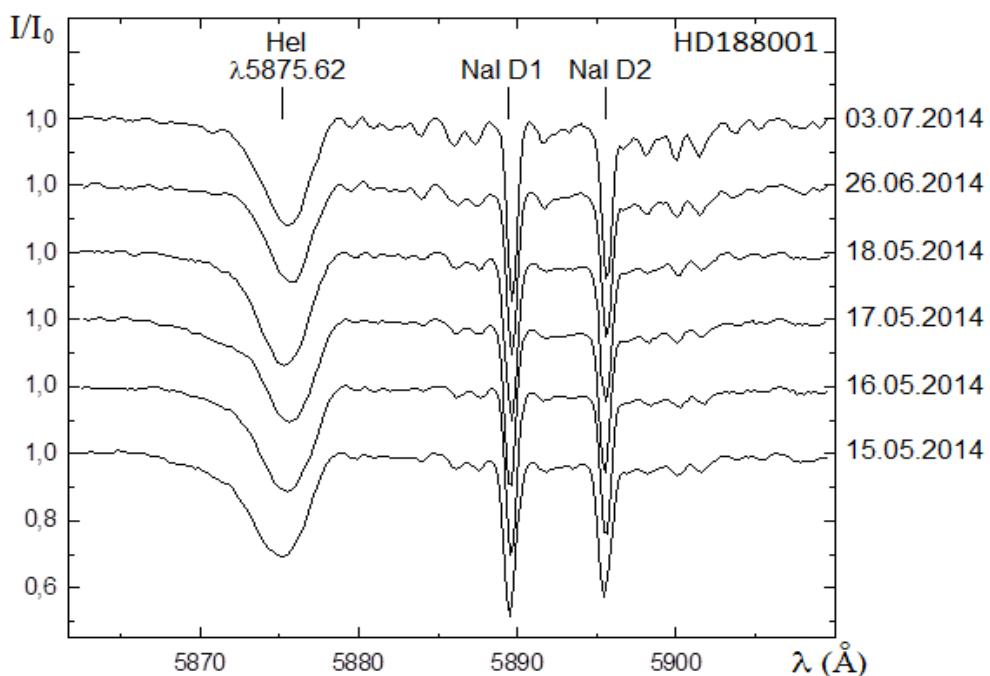
**Şəkil 2.**HD178129 ulduzu spektrlərində H_α , H_β və CII xətlərinin profilləri**Cədvəl 2** H_α , CII, HeI, NaI və H_β xətlərində şüa sürəti və spektral parametrlərin qiymətləri

Tarix	HD178129 (V¹403 Aql)											
	H_α											
	V _r (b) abs. km/s	V _r em. km/s	V _r (q) abs. km/s	r _v (b) abs.	r _v em.	r _v (q) abs.	$\Delta\lambda_{1/2}(b)$ abs. Å	$\Delta\lambda_{1/2}$ em. Å	$\Delta\lambda_{1/2}(q)$ abs. Å	W _λ (b) abs. Å	W _λ em. Å	W _λ (q) abs. Å
16.07.2014	-102	91	271	0.91	1.11	0.97	2.3	1.6	2.0	0.24	0.19	0.07
17.07.2014	-80 -48	91 0.87	-	0.86 0.87	1.08	-	3.4	1.7	-	0.50	0.12	-
23.07.2014	-24	-	-	0.73	-	-	2.7	-	-	0.82	-	-
Tarix	HD178129 (V¹403 Aql)											
	CII 6578.05		CII 6582.88		HeI 5875.62Å			NaI D1	NaI D2	H_β		
	V _r km/s	V _r km/s	V _r km/s	r _v	$\Delta\lambda_{1/2}$ Å	W _λ Å	V _r km/s	V _r km/s	V _r km/s	r _v	$\Delta\lambda_{1/2}$ Å	W _λ Å
16.07.2014	49	37	42	0.62	2.4	0.99	0	1	17 21	0.66	4.3	1.71
17.07.2014	45	37	40	0.57	2.4	1.13	3	3	4	0.63	4.2	1.70
23.07.2014	42	34	27	0.60	2.4	1.08	0	2	3	0.59	3.7	1.73

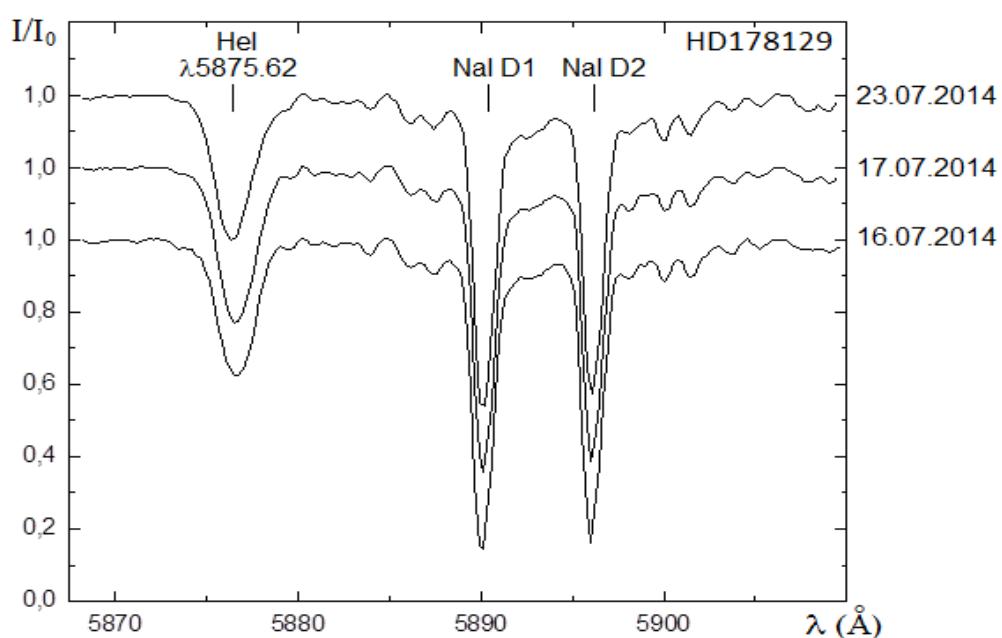
Təəssüf ki, müşahidə materiallarının az olması, həmçinin [30] -da sıfır-punktun verilməməsi səbəbindən bunu araşdırmaq mümkün deyil. Oeyd edək ki, həmin vaxtlarda CII və NaI xətlərində hər hansı dəyişmələr müşahidə olunmayışdır (Şəkil.2 və 4). HeI xəttində isə H_α xətti tam udulma komponenti formasında müşahidə olunarkən şüa sürəti nəzərəçarpacıq dərəcədə azalmışdır. Cədvəl.2-dən məlum olur ki, H_β xəttində spektral

parametrlərin (r_v , $\Delta\lambda_{1/2}$, W_λ) qiymətlərində əhəmiyyətli dəyişmələr baş verməmişdir. Lakin şüa sürəti bir gün ərzində 13÷17 km/s dəyişmə göstərmişdir.

Aparılmış tədqiqatlar göstərir ki, HD188001 və HD178129 ifratnəhəng ulduzları atmosferlərində H_α , H_β və HeI xətlərinin formalasdığı effektiv qatlarda (yuxarı qatlarda) dəyişmələr daha aktivdir.



Şəkil 3
HD188001 ulduzu spektrlərində HeI və NaI xətlərinin profilləri



Şəkil 4
HD178129 ulduzu spektrlərində HeI və NaI xətlərinin profilləri

Məlumdur ki, ifratnəhəng ulduzlarda şüalanma selinin və eləcə də maddə axınının (ulduz küləyinin) dəyişməsi atmosferin yuxarı qatlarında və örtükdə müvafiq dəyişmələr yaradır [33]. Nəticədə, əsasən H_α xəttinin udulma və şüalanma

komponentləri dəyişərək müxtəlif formalarda müşahidə olunur. Bundan əlavə, tədqiq olunan ulduzlarda H_β xəttinin nüvəsində kiçik detallların yaranması və itməsi, nüvənin (pikin) bənövşəyi və qırmızı tərəflərə əyilməsi, o cümlədən HeI xəttində

şüa sürətinin dəyişməsi göstərir ki, bu ulduzların atmosferlərinin yuxarı qatlarında güclü maddə axınları (sıçrayışlı atılmalar) mövcuddur. Hesab edirik ki, HD188001 və HD178129 ifratnəhəng ulduzları spektrlərində H_{α} və H_{β} xətləri profil-lərindəki sürətli dəyişkənliliklər, həmin ulduzların atmosferinin qeyri-stasionarlığı - yuxarı qatlarda güclü maddə axınlarının və örtüyün həyəcanlanmasının nəticəsi kimi izah oluna bilər. Bu hadisələrin etraflı araşdırılması məqsədi ilə ŞAR-da qeyd olunan ulduzların müntəzəm spektral və fotometrik müşahidələrinin aparılması nəzərdə tutulur.

NƏTİCƏ

1. HD188001 və HD178129 ifratnəhəng ulduzlarının spektrlərində H_{α} və H_{β} xətləri profil-lərinin strukturu və şüa sürəti çox qısa zaman intervalında güclü dəyişkənlilik göstərir.
2. Ardıcıl gecələrdə ən çox dəyişmələr şüa sürətində baş verir: HD188001 ulduzu üçün bir gün ərzində şüa sürətinin dəyişməsi H_{α} xəttində $\Delta V_r=15\div21 \text{ km/s}$, H_{β} xəttində isə $\Delta V_r=44 \text{ km/s}$ -dir. HD178129 ulduzu üçün H_{α} xəttində $\Delta V_r=22 \text{ km/s}$, H_{β} xəttində isə $\Delta V_r=13\div17 \text{ km/s}$ qədər dəyişmə göstərir. HeI $\lambda 5875.62$ xəttində şüa sürətlərində də sıçrayışlı dəyişmələr müəyyən olunmuşdur.
3. H_{α} , H_{β} və HeI xətlərində baş verən qısa müdəddəli dəyişmələr isti ifratnəhəng ulduzlarda atmosferin qeyri-stasionarlığı, həmçinin bu xətlərin yarandığı effektiv qatlarda güclü maddə axınlarının olması ilə izah oluna bilər. Bu iş Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının prioritət istiqamətlər üzrə elmi layihəsi tərəfindən dəstəklənir.
4. C.Leitherer, H_{α} as a tracer of mass loss from OB stars, *The Astrophysical Journal*, **326** (1988) 356-367.
5. S.P.Tarafdar, A unified formula for mass-loss rate of O to M star, *The Astrophysical Journal*, **331** (1988) 932-938.
6. S.Scuderi, G.Bonanno, R.Di.Benedetto, D.Spadaro, and N.Panagia, H_{α} observations of early-type stars, *The Astrophysical Journal*, **392** (1992) 201-208.
7. E.Ya.Vilkoviskij and L.V.Tambovtseva, Variability and theoretical upper limit of the mass loss rate in OB stars, *Astronomy and Astrophysics, Suppl. Ser.*, **94** (1992) 109-120.
8. H.J.G.L.M.Lamers and C.Leitherer, What are the mass-loss rates of O stars? *The Astrophysical Journal*, **412** (1993) 771-791.
9. H.J.G.L.M.Lamers, S.Haser, A.de Koter, C.Leitherer, The ionization in the winds of O stars and the determination of mass-loss rates from ultraviolet lines, *The Astrophysical Journal*, **516** (1999) 872-886.
10. A.W.Fullerton, D.L.Massa, R.K.Prinja, The discordance of mass-loss estimates for galactic O-type stars, *The Astrophysical Journal*, **637** (2006) 1025-1039.
11. M.V.McSwain, T.S.Boyajian, E.D.Grundstrom, and D.R.Gies, A spectroscopic study of field and run away OB stars, *The Astrophysical Journal*, **655** (2007) 473-483.

17. C.S.Peri, P.Benaglia, D.P.Brookes, I.R.Stevens, N.L.Isequilla, *E-BOSS: an Extensive stellar BOw Shock Survey: I. Methods and first catalogue, Astronomy & Astrophysics*, **538** A108 (2012) 1-13.
18. L.M.Hobbs and C.E.Albert, *On absorption by hot interstellar GAS. II. [FeXIV] λ 5303, The Astrophysical Journal*, **281** (1984) 639-643.
19. A.B.Underhill, *A study of the spectra of seven Of stars. I. Radial velocities, The Astrophysical Journal, Suppl. Ser.*, **100** (1995) 433-460.
20. A.B.Underhill and J.M.Matthews, *A spectroscopic orbit for the O8If star 9 Sge, Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, **107** (1995) 513-516.
21. A.B.Underhill and J.M.Matthews, *HD188001 9 Sge – An O8If Runaway Binary star, ASP Conference Series*, **90** (1996) 1-3.
22. A.B.Underhill, *A new puzzle regarding the diffuse interstellar bands, Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, **108** (1996) 92.
23. W.G.Bagnuolo, D.J.Barry, *Plaskett's star (HD47129) still more curious, The Astrophysical Journal*, **469** (1996) 347-354.
24. A.A.Barannikov, *Search for photometric eclipses of the runaway star 9 Sge, Comissions 27 and 42 of the IAU information bulletin on variable stars, Konkoly Observatory, Budapest*, **5665** (2005) 1-4.
25. A.A.Aslanov, A.A.Barannikov, *Possible periodic variability of the radial velocity and luminosity of the runaway Of star HD188001 (9 Sge), Astronomy letters*, **18** (1992) 58-62.
26. P.S.Conti, and E.M.Leep, *Spectroscopic observations of O-type stars. V. The hydrogen lines and λ 4686HeII, The Astrophysical Journal*, **193** (1974) 113-124.
27. A.A.Aslanov, L.N.Kornilova, and A.M.Cherepashchuk, *A search for relativistic companions of runaway OB stars, Astronomy Letters*, **10** (1984) 278-281.
28. L.M.Hobbs, *On absorption by hot interstellar GAS. I. [FeX] λ 6375, The Astrophysical Journal*, **280** (1984) 132-138.
29. J.B.Hutchings, *Spectroscopic measurements of OB supergiants, Dominion Astrophysical Observatory Victoria*, **XIV №16** (1976) 355-366.
30. C.Megessier, *Photometric variations of the supergiant B3Ia HD178129, Comissions 27 of the IAU information bulletin on variable stars, Konkoly Observatory, Budapest*, **2689** (1985) 1-4.
31. X.M.Микаилов, B.M.Халилов, I.A.Алекберов, Эшелле – спектрометр фокуса кассегренна 2-х метрового телескопа ШАО НАН Азербайджана, *ŞAR Sirkulyarı*, №109 (2005) 21-29.
32. A.G.Галазутдинов, Система обработки Эшелле-спектров DECH20, Препринт CAO, № 92 (1992).
33. K.Де Ягер, Звезды наибольшей светимости. Москва, Мир, (1984) 493.

INVESTIGATION OF THE SUPERGIANT STARS HD188001 AND HD178129

Y.M.MAHARRAMOV

The information about HD188001 and HD178129 stars and interesting spectral features which obtained at the ShAO in 2014 has been presented. It has been revealed that the profile of the H α line indicated variable structure for a short time in the spectra of the stars. In addition, researching the H α , H β and HeI lines in the spectra of these stars has been revealed that values of the radial velocity and spectral parameters in these lines have strong variability.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗВЕЗД СВЕРХГИГАНТОВ HD188001 И HD178129

Я.М.МАГЕРРАМОВ

В данной работе представлены сведения о звездах сверхгигантах HD188001 и HD178129 и об интересных особенностях наблюдаемых в спектрах полученных в 2014 году в ШАО. Было выявлено, что профили линии H α типа Р Сyg имеют структуры меняющиеся за короткое время в спектрах исследуемых звезд. Кроме того, при изучении линий H α , H β и HeI в спектре этой звезды выявлено, что происходят сильные изменения значений лучевых скоростей и спектральных параметров этих линий.

Редактор: д. н. по физике А.Халилов

MÜNDƏRİCAT

Güclü maqnit sahəsində ifratqəfəslərdə spin parçalanması nəzərə alınmaqla Fermi səviyyəsi S.R.Fiqarova, M.M.Mahmudov.....	3
AdS/KXD-nin yumşaq divar modelində ρ -mezon-nuklon-delta barion qarşılıqlı təsir sabiti İ.İ.Aabayev, N.C.Hüseynova, S.Ə.Məmmədov.....	8
TlInS ₂ kristalinin təməl prinsiplərdən elektron spektrinin və hal sıxlığının hesablanması N.A.İsmayılova, H.S.Orucov.....	15
Gümüş nano-zərrəcikləri plazmon silisium günəş elementləri T.C.Cəfərov, A.M.Paşayev, B.H.Tağıyev, Ş.S.Aslanov, Ş.X.Rəhimov, Ə.Ə.Əliyev.....	20
Ge _x As _y Se _(1-x-y) şüşələrdə atomların radial paylanması funksiyaları S.İ.Mehdiyeva, E.A.Məmmədov, A.E.Məmmədova.....	27
İzopropil spirti molekulunun qos-konformerinin fırlanması spektri A.Ə.Adilov, Ç.O.Qacar, F.H.Məmmədov, A.S.Həsənova.....	32
InSb maya kristalinin istifadəsi ilə ikinci komponentlə qidalanırlı ərintidən alınan InSb-AlSb monokristallarında komponentlərin paylanması modelləşdirilməsi P.H.Əjdərov, M.Ə.Əkpərov, Ə.İ.Ələkpərov, Z.M.Zəhrəbəyova.....	36
Qamma şüalanmanın təsiri ilə H ₂ O ₂ mühitində oksidləşmədən sonra Ni-P təbəqəsinin səthində yaranan oksidlərin tədqiqi A.A.Qəribov, T.N.Ağayev, M.Y.Haşemi.....	40
Termik işlənmə keçmiş Sn _{1-x} Mn _x Te monokristallarının Bi-Sn ərintisi ilə kontaktının elektrik xassələri T.C.Əliyeva, G.C.Abdinova, N.M.Axundova, C.Ş.Abdinov.....	46
Elektrod boşluğunun seolitin dielektrik nüfuzluğunun qiymətinə təsiri V.İ.Orbux, Q.M.Eyyazova, M.B.Muradov, N.N.Lebedeva, B.G.Salamov.....	51
Nano-dioksid sirkoniumda faza keçidlərinin tədqiqi A.A.Qəribov, T.N.Ağayev, G.T.İmanova, İ.A.Məmmədyarova.....	55
TlSe-YbSe sistemində faza tarazlığının öyrənilməsi, TlYbSe ₂ kristalinin elektrik və maqnit xassələri F.M.Seyidov, E.M.Kərimova, R.Z.Sadixov, R.Q.Vəliyev, N.Z.Həsənov, K.M.Hüseynova.....	61
Asetonun mezonizamlı dielektrik spektroskopiyası S.T.Əzizov, K.Ə.Zülfüqarzadə, O.Ə.Əliyev, Ç.O.Qacar.....	66
InSe nanozərrəciklərinin elektrik və optik xassələri A.Q.Kazımzadə, M.Karabulur, A.X.Dinçer, V.M.Salmanov, M.A.Cəfərov, A.Q.Hüseynov, R.M.Məmmədov, A.M.Əliyeva.....	74
İkitip keçiricilikli aşqarlı yarımkəçiricilərdə dayanıqsız termorekombinasiya dalğaları E.R.Həsənov, R.K.Mustafayeva, A.V.İslamzadə.....	83
Pb _{1-x} Sn _x Se/PbSe _{1-x} S _x /BaF ₂ izoperiodik heterokeçidləri H.R.Nuriyev, N.V.Fərəcov, S.S.Fərzəliyev.....	88
Qeyri-nyuton mayenin dairəvi silindirik borularda hərəkəti zamanı yaranan özlük Q.T.Həsənov, A.N.Cəfərova, M.Ə.Cəfərova.....	92
Enerji mənbələri üçün istifadə oluna bilən polimer-seqnetopyezokeramika əsasında elektret kompoziti M.Ə.Qurbanov, Z.A.Dadaşov, F.N.Tatardar, I.S.Ramazanova, A.A.Bayramov, E.Q.Həşimov.....	98
Yarımkeçirici-metal tipli GaSb-CrSb evtektik kompozitin termodinamik xassələri R.N.Rəhimov, İ.X.Məmmədov*, M.V.Kazimov D.H.Arashlı, A.A.Ə.Xəlilova.....	104
Şuşəvari SiO ₂ əsasında iki və üç komponentli şüşəybənzər sistemlərin aşağı temperaturlarda istilik tutumunun anomaliyası N.N.Əliyev.....	108
K _{0,965} Rb _{0,035} NO ₃ kristallarında quruluş faza çevrilmələri V.İ.Nəsirov, R.B.Bayramov.....	112
Çoxelektroldu kompozitli elektrikqızdırıcılarının elektrik və konstruktiv parametrlərinin hesablanması modeli S.A.Hüseynova, T.M.Xalina.....	119

MÜNDƏRİCAT

Yarımkeçirici kvant diskdə fononlar vasitəsilə elektronların relaksasiyası H.B.İbrahimov, R.Q.Abaszadə.....	124
Spektroskopik ellipsometriya ölçmələrinin tədqiqində "Graphical analysis" programının üstünlükləri O.R.Əhmədov, M.H.Hüseynəliyev, N.M.Abdullayev, X.N. Xəlilova, N.A.Qasımov.....	128
Yarimmaqnit yarımkəcicilərdə paramaqnit ionların nüvə maqnit rezonansının nəzəriyyəsi M.N.Əliyev.....	132
IL CEP A ulduzunun optik spektrinin dəyişkənliyi. I. Hidrogenin H_α və H_β xətləri N.Z.İsmayılov, O.V.Xəlilov, G.R.Bahəddinova.....	136
Meteorid selləri komet nüvələrindəki aktiv proseslərin mümkün faktoru kimi Ə.S.Quliyev, G.İ.Koxirova, Ü.C.Poladova.....	148
HD 161796 (F3 Ib) ulduzunun atmosfer parametrlərinin təyini Ə.R.Həsənova, Ə.M.Xəlilov, G.M.Hacıyeva.....	153
HD188001 VƏ HD178129 ifratnəhəng ulduzlarının tədqiqi Y.M.Məhərrəmov.....	158

CONTENTS

Fermi level in superlattices in strong magnetic field taking into account spin splitting S.R.Figarova, M.M.Mahmudov.....	3
ρ-meson- nucleon–delta baryon coupling constant for the soft-wall AdS/QCD model I.I.Aabayev, N.J. Huseynova, Sh.A.Mamedov.....	8
Electron spectrum and dos calculations for TlInS ₂ crystal from first principles N.A.Ismayılova, G.S.Orudzhev.....	15
Silicon plasmon solar cells with silver nanoparticles T.D.Dzhafarov, A.M.Pashaev, B.G.Tagiev, S.S.Aslanov, S.H.Ragimov, A.A.Aliev.....	20
Atomic radial distribution functions of Ge _x As _y Se _(1-x-y) glasses S.I.Mehdiyeva, E.A.Mammadov, A.E.Mammadova.....	27
The rotational spectrum of gauche-isopropyl alcohol (CH ₃) ₂ CHOH A.A.Adilov, Ch.O.Qajar, F.H.Mammadov, A.S.Qasanova.....	32
Study of oxides formed on electroless Ni-p layer after oxidation in H ₂ O ₂ solution with gamma irradiation A.A.Garibov, T.N.Agayev, M.Y.Hashemi.....	36
Modeling of components distribution in InSb-AlSb solid solution crystals grown by the feeding of the melt with the second component method using InSb seed P.G.Azhdarov, M.A.Akperov, A.I.Alekperov, Z.M.Zakhrabekova.....	40
Electrical properties contact annealed single crystals Sn _{1-x} Mn _x Te alloyed Bi-Sn T.D.Alieva, G.D.Abdinova, N.M.Akhundova, D.Sh.Abdinov.....	46
The influence of electrode gap on the dielectric constant of the zeolite V.I.Orbukh, G.M.Eyvazova, N.N.Lebedeva, M.B.Muradov, B.G.Salamov.....	51
Investigation of phase transitions in nano-zirconium dioxide A.A.Garibov, T.N.Agayev, G.T.Imanova, I.A.Mammadyarova.....	55
The study of phase equilibrium in the system TlSe-YbSe, electrical and magnetic properties of TlYbSe ₂ crystal F.M.Seyidov, E.M.Kerimova, R.Z.Sadixov, R.G.Veliyev, N.Z.Gasanov, K.M.Guseynova.....	61
Dielectric spectroscopy of mesoorder in Acetone S.T.Azizov, K.E.Zhulfugarzade, O.A.Aliev, Ch.O.Kadjar.....	66
Electrical and optical properties of InSe nanoparticles A.G.Kyazym-Zade, M.Karabulur, A.X.Dincher, V.M.Salmanov, M.A.Jafarov, A.G.Huseynov, R.M.Mamedov, A.M.Alieva.....	74
Unstable thermorecombination waves in impurity semiconductors with two types of current carriers E.R.Hasanov, R.K.Mustafaev, A.V.Islamzade.....	83
Isoperiodic heterojunction Pb _{1-x} Sn _x Se/PbSe _{1-x} S _x /BaF ₂ H.R.Nuriyev, N.V.Farajov, S.S.Farzaliyev.....	88
The viscosity of non-newtonian fluid in the flow of a round cylindrical tube G.T.Hasanov, A.N.Jafarova, M.A.Jafarova.....	92
Electret polymer-ferropiezoceramicscomposite for energy source M.A.Kurbanov, Z.A.Dadashov, F.N.Tatardar, I.S.Ramazanova, A.A.Bayramov, E.G.Gashimov.....	98
Thermodynamic properties of GaSb-CrSb semiconductive-metal type eutectic composite R.N.Rahimov, I.Kh.Mammadov, M.V.Kazimov, D.H.Arasy, A.A.Khalilova.....	104
Anomaly in heat capacity of SiO ₂ –Al ₂ O ₃ , SiO ₂ –TiO ₂ , SiO ₂ –B ₂ O ₃ – Na ₂ O and SiO ₂ –Al ₂ O ₃ –Na ₂ O glass like systems at law temperatures N.N.Aliyev.....	108
Structural phase transformations in K _{0,965} Rb _{0,035} NO ₃ V.I.Nasirov, R.B.Bayramov.....	112
Model for calculating the electric and contructural parameters of multi-electrode composite electric radiators S.A.Huseynova, T.M.Khalina.....	119
Phonon-induced electron relaxation in a semiconductor quantum disk G.B.Ibragimov, R.G.Abaszade..	124

CONTENTS

Advantages to use the "Graphical analysis" program in data processing in spectroscopy ellipsometric research	
O.R.Ahmadov, M.H.Huseynaliyev, N.M.Abdullayev, X.N.Chalilova, N.A.Gasimov.....	128
Theory of the magnetic resonance of paramagnetic ion nuclei in semimagnetic semiconductors	
M.N.Aliyev.....	132
Optical spectrum variability of IL Cep A. I. The H _α and H _β lines of hydrogen	
N.Z.İsmailov, O.V.Khalilov, G.R.Bahaddinova.....	136
On possible role of meteor streams in the splitting of cometary nuclei	
A.S.Guliyev, G.I.Kokhirova, U.J.Poladova.....	148
Determination of atmospheric parameters of star HD 161796 (F3 Ib)	
A.R.Hasanova, A.M.Khalilov, G.M.Hajiyeva.....	153
Investigation of the supergiant stars HD188001 and HD178129	
Y.M.Maharramov.....	158

СОДЕРЖАНИЕ

Ферми электронного газа в сверхрешетках в сильном магнитном поле с учетом спинового расщепления	
С.Р.Фигарова, М.М.Махмудов.....	3
Константа взаимодействия ρ -мезона с нуклоном и дельта барионом в модели мягкой стены АдС/КХД	
И.И.Атаев, Н.Дж.Гусейнова, Ш.А.Мамедов.....	8
Расчеты из первых принципов электронного спектра и плотности состояний кристалла TlInS ₂	
Н.А.Исмайилова, Г.С.Оруджев.....	15
Плазмонные кремниевые солнечные элементы с серебряными наночастицами	
Т.Д.Джафаров, А.М.Пашаев, Б.Г.Тагиев, Ш.С.Асланов, Ш.Х.Рагимов, А.А.Алиев.....	20
Функции радиального распределения атомов в стеклах Ge _x As _y Se _(1-x-y)	
С.И.Мехтиева, Э.А.Маммадов, А.Э.Маммадова.....	27
Вращательный спектр гош-конформера молекулы изопропилового спирта	
А.А.Адилов, Ч.О.Каджар, Ф.Х.Маммадов, А.С.Гасанова.....	32
Моделирование распределения компонентов в кристаллах твердых растворов InSb-AlSb, выращенных методом подпитки расплава вторым компонентом с использованием InSb затравки	
П.Г.Аждаров, М.А.Акперов, А.И.Алекперов, З.М.Захрабекова.....	36
Изучение оксидов на поверхности Ni-P слоя после окисления в растворе под действием гамма облучения	
А.А.Гарифов, Т.Н.Агаев, М.И.Хашеми.....	40
Электрические свойства контактов отожженных монокристаллов Sn _{1-x} Mn _x Te со сплавом Bi-Sn	
Т.Д.Алиева, Г.Д.Абдинова, Н.М.Ахундова, Д.Ш.Абдинов.....	46
Влияние приэлектродного зазора на определение диэлектрической проницаемости в цеолите	
В.И.Орбух, Г.М.Эйвазова, Н.Н.Лебедева, М.Б.Мурадов, Б.Г.Саламов.....	51
Фазовые переходы вnano-диоксиде циркония	
А.А.Гарифов, Т.Н.Агаев, Г.Т.Иманова, И.А.Мамедъярова.....	55
Изучение фазовых равновесий в системе TlSe-YbSe, электрические и магнитные свойства кристалла TlYbSe ₂	
Ф.М.Сеидов, Э.М.Керимова, Р.З.Садыхов, Р.Г.Велиев, Н.З.Гасанов, К.М.Гусейнова.....	61
Диэлектрическая спектроскопия мезорядка в ацетоне	
С.Т.Азизов, К.Э.Зульфугарзаде, О.А.Алиев, Ч.О.Каджар.....	66
Электрические и оптические свойства наночастиц InSe	
А.Г.Кязым-Заде, М.Карабулур, А.Х.Динчер, В.М.Салманов, М.А.Джафаров, А.Г.Гусейнов, Р.М.Мамедов, А.М.Алиева.....	74
Неустойчивые терморекомбинационные волны в примесных полупроводниках с двумя типами носителей тока	
Э.Р.Гасанов, Р.К.Мустафаева, А.В.Исламзаде.....	83
Изопериодическая гетероструктура Pb _{1-x} Sn _x Se/PbSe _{1-x} S _x /BaF ₂	
И.Р.Нуриев, Н.В.Фараджев, С.С.Фарзалиев.....	88
Вязкость при течении неильтоновской жидкости по круглым цилиндрическим трубам	
Г.Т.Гасанов, А.Н.Джафарова, М.А.Джафарова.....	92
Электретный композит полимер-сегнетопьезокерамика и возможности его исследования как источника энергии	
М.А.Гурбанов, З.А.Дадашев, Ф.Н.Татардар, И.С.Рамазанова, А.А.Байрамов, Э.Г.Гашимов.....	98
Термодинамические свойства эвтектического композита GaSb-CrSb типа полупроводник-металл	
Р.Н.Рагимов, И.Х.Мамедов, М.В.Кязымов, Д.Г.Араслы, А.А.Халилова.....	104
Аномалия темлоемкости стеклообразных систем SiO ₂ -Al ₂ O ₃ , SiO ₂ -TiO ₂ ,	

СОДЕРЖАНИЕ

SiO ₂ –B ₂ O ₃ –Na ₂ O и SiO ₂ – Al ₂ O ₃ –Na ₂ O при низких температурах Н.Н.Алиев.....	108
Структурные фазовые превращения в кристаллах K _{0,965} Rb _{0,035} NO ₃ В.И.Насиров, Р.Б.Байрамов.....	112
Модель для расчета электрических и конструкционных параметров многоэлектродных композиционных электрообогревателей С.А.Гусейнова, Т.М.Халина.....	119
Электронная релаксация, вызываемая фононами в полупроводниковом квантовом диске Г.Б.Ибрагимов, Р.Г.Абасзаде.....	124
Преимущества использования программы "Graphical analysis" в обработке данных в спектроскопо-эллипсометрических исследованиях О.Р. Ахмедов, М.Г. Гусейналиев, Н.М.Абдуллаев, Х.Н.Халилова, Н.А.Гасымов.....	128
Теория магнитного резонанса на ядрах парамагнитных ионов в полумагнитных полупроводниках М.Н.Алиев.....	132
Спектральная переменность звезды IL СЕР. I. Линии водорода H _α и H _β Н.З.Исмаилов, О.В.Халилов, Г.Р.Бахаддинова.....	136
Метеороидные рои как возможный фактор активных процессов в кометных ядрах А.С.Гулиев, Г.И.Кохирова, У.Д.Поладова.....	148
Определение атмосферных параметров звезды HD 161796 (F3 Ib) А.Р.Гасанова, А.М.Халилов, Г.М.Гаджиева.....	153
Исследование звезд сверхгигантов HD188001 и HD178129 Я.М.Магеррамов.....	158

INSTRUCTIONS TO CONTRIBUTORS

Journal "TRANSACTIONS" accepts original articles and short notes in various fields of research in physics and astronomy. Contribution is open to researchers of all nationalities.

Manuscripts should be written in Azerbaijani, English and Russian. Each paper should always be preceded by an abstract in language of this work. Article submitted for publication should be typed in one interval on white paper of the standard form 210x297mm with standard margins (top – 30mm, bottom – 30mm, left – 22,5mm, right – 22,5mm) by normal type, including the name of organization, its address, telephone number, e-mail. Manuscripts should contain one original, one copy, and one CD disk with appropriate article in Microsoft Word™ (any version). Unaccepted manuscripts are not returned to the author. All manuscripts should be accompanied by a letter from the laboratory or university where the research has been carried out.

1. TITLE PAGE.

Each title page should contain:

- PACS, title of the paper, names of authors, name and address of the laboratory or university, e-mail where the research has been carried out, the abstract in language of the paper, key words.

2. REFERENCES.

References should be listed in the order in which they appear in the text. The method of citation should be as follows:

- papers in periodicals: names of authors (A.A.Aliyev title of the paper), title of paper and periodical, volume or series number, year of publication, start and final pages;
- books and theses: names of authors, title of the paper or theses, title of the book or theses, place and year of publication, chapter number, pages.

3. ABSTRACT.

Abstract should be typed on a separate sheet in other two languages and should not contain more than 70 words.

4. FIGURES.

Figures should be neatly drawn on a good white base or presented as photographs. Figures drawn larger than 125x160mm and smaller than 60x60mm will not be accepted. Captions of all figures must be typed on a separate sheet. The same side of each figure must have a number and title of the article. The name of the coordinate axis's must be written very clearly. Each line on the graph should be numbered and explanation given in captions. The article should not contain more than 5 figures.

5. TABLES.

Tables must be typed on separate sheets. They should be numbered and titled, the size should not exceed 125x160 mm. The article should not contain more than 5 tables.

6. ADDRESS.

The articles should be sent to the following address: Azerbaijan, AZ 1143, Baku, H.Javid ave., 131, IFAN.

Tel: (99412)539-33-15, E-mail:jtransactions@physics.ab.az; www.physics.gov.az

Founder

Azerbaijan National Academy of Sciences

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Журнал "ИЗВЕСТИЯ" принимает оригинальные статьи и краткие сообщения, посвященные различным областям физики и астрономии. Статьи принимаются от исследователей всех стран.

Рукописи принимаются на азербайджанском, русском и английском языках. В начале каждой статьи должна быть напечатана аннотация на языке статьи (не более 70 слов). Статьи, направляемые в печать, должны быть напечатаны на белой бумаге на одной стороне стандартного листа 210x297мм через 1 интервал, соблюдая стандартные поля (сверху – 30мм, слева – 22,5мм, снизу – 30мм, справа – 22,5мм), шрифт в тексте нормальный, прямой 12, заголовок и авторы – жирным 12, организация, почтовый адрес, телефон, e-mail – нормальным 12, текст – спустя 2 интервала. Статьи должны быть представлены в двух экземплярах и на CD диске в формате Microsoft Word™, любая версия, шрифт Times New Roman. К статье должно прилагаться сопроводительное письмо с места работы авторов. Статьи, не принятые к печати, авторам не возвращаются.

1. ТИТУЛЬНЫЙ ЛИСТ.

На титульном листе статьи печатается УДК, через одну строку название статьи, инициалы и фамилии авторов, место работы, адрес организации с указанием почтового индекса, e-mail исследователей, аннотация на языке статьи, ключевые слова.

2. ЛИТЕРАТУРА.

Список литературы печатается в порядке упоминания в статье и оформляется следующим образом:

- для журнальных статей: инициалы и фамилии авторов, название статьи и журнала, том или серия, номер, год издания, начальная и конечная страница;
- для книг и тезисов: полное название книги или тезисов, инициалы и фамилии авторов, место и год издания, страница.

3. АННОТАЦИЯ.

На отдельном листе печатается аннотация на остальных двух языках.

4. РИСУНКИ.

Рисунки должны быть выполнены четко и представлены на CD диске в JPG формате. Размеры рисунков должны быть не более 125x160мм и не менее 60x60мм. Подписи к рисункам печатаются на отдельном листе, на обратной стороне его номер и название статьи. На рисунках должны отсутствовать разъясняющие тексты и надписи. На координатных осях названия указываются крупно и четко на английском языке. Если на графике дано несколько кривых, то их следует пронумеровать, а разъяснение к нумерации дать в подписи к рисунку.

5. ТАБЛИЦЫ.

Таблицы представляются на отдельном листе. Они должны быть пронумерованы и озаглавлены. Размеры таблиц не должны превышать 125x160мм. Статья не должна содержать более 5 таблиц.

6. АДРЕС.

AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавида 131, Институт Физики НАН Азербайджана.

Tel: (99412)539-33-15, E-mail:jtransactions@physics.ab.az; www.physics.gov.az

УЧРЕДИТЕЛЬ

Национальная Академия Наук Азербайджана