

ISSN 2521-6368

Volume 7
Number 1
2023

Journal of Baku Engineering University

P H Y S I C S

Journal is published twice a year
Number - 1. June, Number - 2. December

An International Journal

<http://journal.beu.edu.az>

Founder

Havar Mammadov

Editor-in-chief

Niftali Qocayev

Co-Editor

Razim Bayramov

Editorial advisory board

*Azer Ahmedov (Baku State University, Azerbaijan)
Cahangir Huseynov (Azerbaijan, Azerbaijan Pedagogical University)
Eldar Masimov (Azerbaijan, Baku State University)
Eyyub Gulyev (Azerbaijan, National Academy of Sciences)
Farhad Rustamov (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Gulnara Akhverdiyeva (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Izzet Efendiyeva (Azerbaijan, Baku State University)*

*Larisa Ismayilova (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Kerim Allakhverdiyev (Azerbaijan, National Aviation Academy of Azerbaijan)
Nadir Gahramanov (Azerbaijan, Baku State University)
Namiq Ahmedov (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Sajida Abdulvahabova (Azerbaijan, Baku State University)*

International Advisory board

*Ahmed Abdinov (Azerbaijan, Baku State University)
Anar Rustamov (Germany, Hote Frankfurt University)
Ali Javan (USA, Massachusetts Institute of Technology)
Adil R. Abduragimov (USA, University of California, Los Angeles)
Amrulla Mamedov (Turkey, Bilkent Universit)
Faig Mikailzade (Turkey, Gebze Technical University, Kocaeli)
Gulshen Agayeva (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Irada Aliyeva (Azerbaijan, Baku State University)
Garib Murshudov (York Akademy, UK, London)
Hamed Sari-Sarraf (USA, Texas Technik University)
Eden Mamut (Romania, Black Sea Universities Network Center)
Elsen Veli Veliyev (Turkey, Kocaeli University)
Kamran T. Mahmudov (University of Lisbon, Porugal)
Kev Salihov (Tataristan, Kazan University)
Khalil Kälantär (Displays and Optical Technologies, Japan, Tokio)
Konstantin Voldemarovich Shaitan (Russia, Moscow State University)
M.Iqbal Choudhary (University of Karachi, Pakistan)
Natiq M. Atakishiyev (Universidad National Autonoma de Mexico)
Nizami Gasanliy (Middle East Technical University, Turkey)
Oktai Gassumov (Azerbaijan National Academy of Sceince, Baku)
Oguz Gulseren (Bilkent University, Turkey)*

*Olgun Guven (Turkey, Hacettepe University)
Rasim Mamedov (Azerbaijan, Baku State University)
Rauf Jafarov (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Sebahattin Tuzemen (Turkey, Ataturk University)
Sevim Akyuz (Turkey, Istanbul University)
S.V. Chernyshenko (Germany, Koblenz University)
Suleyman I. Allakhverdiev (Russian, Akademy Science, Moscow)
Svetlana Demuhamedova (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Takhtasib Aliyev (METU, Ankara,Turkey)
Taleh Yusifov (University of California, USA, Los Angeles)
Tariel Ismayilov (Azerbaijan, Baku State University)
Tarana Aliyeva (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Tarlan Efendiye (Belarus, National Academy of Science)
Toshi Nagata (Japan, National Institute for Natural Science)
V. Thavasi (Singapore, National Univeristy of Singapore)
Vagif Nasirov (Azerbaijan, Azerbaijan Pedagogical University)
Vladimir Pashenko (Russia, Moscow State University)
Veli Gusseynov (National Academy of Science, Baku, Azerbaijan)
Vladimir Gorbarchuk (Poland, Lyubel Polytechnic University)
Yusif Nurullayev (Azerbaijan, Baku State University)
Yusuf Sahin (Turkey, Ataturk University)*

Executive Editors

Shafag Alizade

Assistant Editors

*Ulker Agayeva
Lala Hajiyeva*

Design

Ilham Aliyev

Contact address

*Journal of Baku Engineering University
AZ0102, Khirdalan city, Hasan Aliyev str. 120, Absheron, Baku, Azerbaijan
Tel: 00 994 12 - 349 99 95 Fax: 00 994 12 349-99-90/91*

e-mail: jr-physics@beu.edu.az

web: <http://journal.beu.edu.az>

facebook: [Journal Of Baku Engineering University](https://www.facebook.com/Journal-Of-Baku-Engineering-University-102910111111111/)

Copyright © Baku Engineering University

ISSN 2521-6368



**Journal of
Baku Engineering
University**

PHYSICS

Baku - AZERBAIJAN

Journal of Baku Engineering University

PHYSICS

2023. Volume 7, Number 1

CONTENTS

LOW-DIMENSIONAL ELECTRON SYSTEMS PROPERTIES DEPENDING ON DENSITY OF STATE

Sophia R. Figarova, Mehdi M. Mahmudov 3

CAPTURE OF NUCLEON CLUSTERS BY PROTON

Abdulvahabova S.G. 14

POLARIZATION EFFECTS AND AZIMUTHAL SYMMETRY IN SCATTERING PROCESSES

I.G. Afandiyeva, R.A. Ahmedov 18

ELEKTROLİTLƏRDƏ HİDRATASIYA PROSESİNİN REFRAKTOMETRİK TƏDQİQİ

E.Ə.Məsimov, B.G.Paşayev, G.M.Şahbazova, J.Z.Teymurova 23

PEQ-LİMON TURŞUSUNUN NA DUZU-SU İKİFAZALI SİSTEMİNİN FAZALARININ FİZİKİ-KİMYƏVİ XASSƏLƏRİNİN TƏDQİQİ

Şahbazova G.M., Əliyev E.Z., Mirzəzadə A.V. 29

STUDY OF SOL-GEL PHASE TRANSITION IN THE AGAROSE-WATER SYSTEM BY ELECTRICAL CONDUCTIVITY

E.A.Masimov, A.R.Imamaliyev, A.H.Asadova 34

ТЕПЛОВОЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ, ИЗОТЕРМИЧЕСКОЕ СЖИМАЕМОСТИ И УПРУГИХ ПАРАМЕТРОВ СОЕДИНЕНИЙ TLGAS2 И TLGASE2

Курбанов М. М., Годжаев М. М., Маммадов Ф. А., Салимова В.В. 40

THERMAL QUENCHING OF PHOTOCURRENT IN CUIN₅S₈

Bayramova A.I., Guseinov A.G. 45

PACS: 68.65. Cd, 73.50. BkUDC: 539.21

LOW-DIMENSIONAL ELECTRON SYSTEMS PROPERTIES DEPENDING ON DENSITY OF STATE

Sophia R. FIGAROVA, Mehdi M. MAHMUDOV

Baku State University

Z. Khalilov Street, 23, AZ1148, Baku, Azerbaijan

*mehdimahmudov@bsu.edu.az***ABSTRACT**

The thermodynamic characteristics, namely entropy, electron heat capacity and magnetization, as well as the kinetic effect - the thermopower of a two-dimensional electron gas in quantum wells and superlattices are studied. It is shown that the considered physical characteristics are directly proportional to the density of states and their behavior is completely determined by this function

Ключевые слова: two-dimensional electron gas, density of states, entropy, magnetization, thermopower thermopower.

СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ ЗАВИСЯЩИЕ ОТ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЯ

РЕЗЮМЕ

Исследованы термодинамические характеристики, а именно энтропия, электронная теплоемкость и намагниченность, а также термоэдс двумерного электронного газа в квантовых ямах и сверхрешетках. Показано, что рассматриваемые физические характеристики прямо пропорциональны плотности состояний и их поведение полностью определяется этой функцией.

Ключевые слова: двумерный электронный газ, плотность состояний, энтропия, намагниченность, термоэдс.

AŞAĞIÖLÇÜLÜ ELEKTRON SİSTEMLƏRİNİN HAL SIXLİĞİ FUNKSIYASINDAN ASILI OLAN XASSƏLƏRİ XÜLASƏ

İşdə mürəkkəb profilli kvant çuxurlarında və ifratqəfəslərdə ikiölçülü elektron qazının entropiyası, elektron istilik tutumu, maqnitlənmə əmsali kimi termodinamik xarakteristikaları və həmçinin termoelektrik hərəkət qüvvəsi nəzəri olaraq tədqiq olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, tapılmış bu fiziki kəmiyyətlər hal sixlığı funksiyası ilə düz mütənasib olur və onların fiziki xüsusiyyətləri tamamilə bu funksiya ilə müəyyən edilir.

Açar sözlər: ikiölçülü elektron qazı, hal sixlığı funksiyası, entropiya, maqnitlənmə, termoelektrik hərəkət qüvvəsi.

1. Introduction

The density of states of low dimensional electron systems essentially influences on many physical characteristics [1-3]. There are physical quantities, which are directly proportional to the density of states, and their behavior is completely dictated by it, e.g. entropy, heat capacity, thermopower and magnetization [4-7]. In this work we in detail as an example, consider a superlattice in a quantized magnetic field and quantum wells. The entropy of a degenerate two-dimensional electron gas is significantly greater than in the three-dimensional case [4], and its value is determined by the parameters of the low-dimensional

electron gas. Depending on the degree of filling of the miniband of the superlattice, the magnetization changes sign and becomes positive in the strictly two-dimensional case [5]. The thermoelectric power of both the size-quantized film and the superlattice is an oscillating function in magnetic field [6-8].

2. Two-dimensional electron gas density of state

In this work a two-dimensional electron gas in two cases a quantum well of complex shape and a superlattice in a strong magnetic field are considered.

As is known, the chief model of rectangular quantum well is a crude approximation: in real structures spatially separated charges cause an appearance of electrostatic potential, this in turn results in band edges bending, transforming the rectangular quantum well into the parabolic type one [9]. In order to find energy levels for the potential profile having a finite width but no angles, we employ the function [10]:

$$U = \frac{U_0}{\cos^2(z/a)} \quad (1)$$

here a is the quantum well width, U_0 is the potential energy minimum. Quantum well potential (1) describes wide and narrow quantum wells, includes rectangular and parabolic potentials, its profile depends on the quantum well width and Fermi level position.

Solving the Schrödinger equation with potential energy (1) gives energy spectrum of two-dimensional electron gas:

$$\varepsilon(n, k_x, k_y) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m} + \varepsilon_n \quad (2)$$

where $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$, m is the electron effective mass and the form $\varepsilon = \varepsilon_{n1}$ depends on the specific type of potential in the z direction.

We considered ε_n in the following form:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{01} \left(1 + 2n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_{01}}} \right)^2 \quad (3)$$

here $\varepsilon_{01} = \hbar^2 \pi^2 / 8ma^2$ at $n = 0$ and $U_0 = 0$, $n = 0, 1, 2, \dots$ is the quantum number.

Two model problems, frequently used in quantum mechanics - the spectrum of particle energy in a rectangular potential well and the spectrum of harmonic oscillator energy - are particular cases of spectrum (3).

For energy spectrum (3), the density of states of two-dimensional electron gas is [11]:

$$g_{2D} = \frac{m}{\pi \hbar^2 a} \sum_n \Theta(\varepsilon - \varepsilon_n) \quad (4)$$

where $\Theta(\varepsilon - \varepsilon_n)$ - is the step-like Heaviside function. Based on the formula (6), the dependence of the density of states on the energy (Fig.1), quantum well parameter (Fig.2) and quantum well width (Fig.3) were constructed. Here $m = 0,067m_0$, $a = 10\text{ nm}$ is taken.

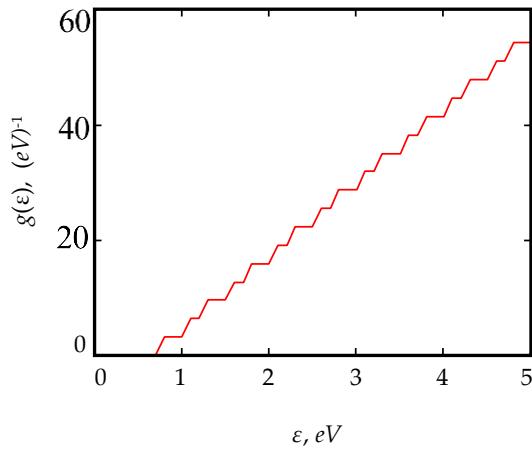


Fig.1. Energy (ϵ) dependence of the density of states of the quantum well.

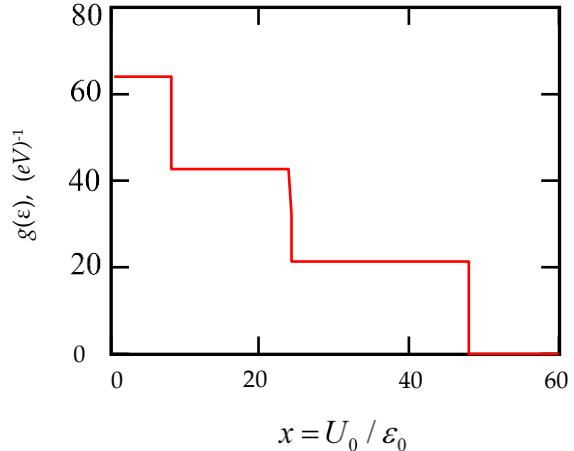


Fig.2. Dependence of the density of states of the quantum well on the quantum well parameter.

As can be seen from Fig.1, the graph of the density of states has a stepwise character [3]. Here, the energy dependence of the density of states corresponds to the energy dependence of the density of states in a rectangular quantum well in [4].

The density of states increases with increasing energy. As can be seen from Fig.2, the dependence of the density of state on the parameter of the quantum well is stepwise, and as the parameter of the quantum well increases, the density of state decreases. Examination of Fig.3 shows that the density of states decreases as the width of the quantum well increases.

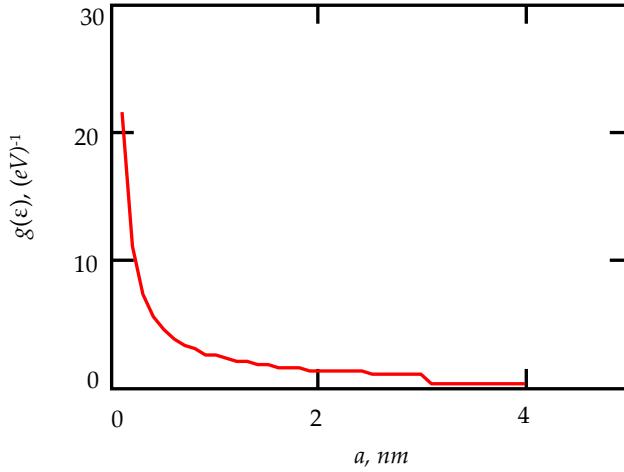


Fig. 3. Dependence of the density of states of the quantum well on the width (a) of the quantum well.

We employed the energy spectrum of a quasi-two-dimensional electron gas in a quantizing magnetic field in a superlattice [12]:

$$\varepsilon(N, k_z) = (2N + 1)\mu B + \varepsilon_{02}(1 - \cos Z(\varepsilon)) \quad (5)$$

where $N = 0, 1, 2, \dots$ is the oscillator quantum number, $k_z = k_z(\varepsilon, N)$ is the wave vector component parallel to the superlattice axis, $\mu = (m_0/m_\perp)\mu_0$, $\mu_0 = e\hbar/2m_0$ is the Bohr

magneton, m_0 is the free electron mass, m_\perp is the electron mass in the layer plane; B is the magnetic field induction, $Z(\varepsilon) = ak_z(\varepsilon, N) = \arccos[1 - (\varepsilon_N - \varepsilon/\varepsilon_{02})]$, ε_{02} is the mini-band half-width in the k_z -direction, $\varepsilon_N = (2N+1)\mu B$, a is the lattice constant along the z -axis.

The density of states of the energy spectrum (5) has the form:

$$g_B(\varepsilon) = \frac{1}{a(\pi R_B)^2} \sum_N (2\varepsilon_{02}\varepsilon_z - \varepsilon_z^2)^{-1/2} = \frac{1}{a\varepsilon_{02}(\pi R_B)^2} \sum_N \sin^{-1}(ak_z), \quad (6)$$

here $\varepsilon_z = \varepsilon(N, k_z) - (2N+1)\mu B$, $R_B = (\hbar/eB)^{1/2}$ is the magnetic length. The density of states has a singularity at $\varepsilon_z = 2\varepsilon_{02}$; if $\varepsilon_z > 2\varepsilon_{02}$.

3. Entropy and electron heat capacity

Using the Gibbs method [13], from the grand thermodynamic potential of two-dimensional electron gas:

$$\Omega = -\frac{Vm}{\pi a \hbar^2} \sum_n \Theta(\varepsilon - \varepsilon_n) \int_{\varepsilon_n}^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_n) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (7)$$

where $f(\varepsilon)$ is the Fermi distribution function, and from the grand thermodynamic potential of two-dimensional electron gas in strong magnetic field:

$$\Omega = \frac{k_0 TV}{2(\pi R)^2} \sum_N \int_{\varepsilon_N}^{\infty} \frac{dk_z(\varepsilon, N)}{d\varepsilon} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{\zeta - \varepsilon}{k_0 T} \right) \right) d\varepsilon, \quad (8)$$

where $R_B = (\hbar/eB)^{1/2}$ is the magnetic length, we can obtain expression for entropy by the formula:

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \zeta} \quad (9)$$

In the first approximation with respect to degeneracy the entropy and electron heat capacity acquires the form [4,14,15]:

$$S, C_V = \frac{\pi^2}{3} k_0^2 T g(\zeta_F) \quad (10)$$

where $g(\zeta_F)$ is the density of states at the Fermi level [4],

$$\zeta_F = \mu B + \varepsilon_{02} \left[1 - \cos \left(\frac{n_{el} a \pi^2 R_B^2}{2} \right) \right] \quad (11)$$

here ζ_F is the Fermi level in a magnetic field at $T = 0K$, n_{el} is the concentration of electrons.

In the two-dimensional case, energy is reckoned not from zero but from the first subband bottom of size quantization, $g(\zeta_F)$ is the density of states at the Fermi level. A similar expression is also obtained for heat capacity of two-dimensional electron gas. As seen, entropy and heat capacity of degenerate two-dimensional electron gas oscillate with the thickness and reproduce the density of states behavior at the Fermi level, the ratio of two-

dimensional electron gas entropy to three-dimensional electron gas one is defined by the ratio of their densities of states [4]:

$$\frac{S_{2D}}{S_{3D}} = \frac{g_{2D}}{g_{3D}} \quad (12)$$

here g_{2D} is formula (4). The expression for g_{3D} is given in [6]. From the formula, it is obvious that two-dimensional electron gas entropy is larger than that of three-dimensional electron gas, which is associated with an increase in the density of states of two-dimensional electron gas in comparison with the density of states of three-dimensional electron gas. That takes place if the number of degrees of freedom of low dimensional electron gas reduces, resulting in an increase in the concentration at the given chemical potential [14].

Dependence of entropy on the quantum well parameter is presented in Fig. 4; this dependence is step-wise and at the specific ratio between the quantum well parameter and first film level, entropy drastically approaches zero. Entropy drops since the density of states of two-dimensional electron gas decreases with the Fermi level growth depending on the quantum well parameter x at the given concentration of electrons.

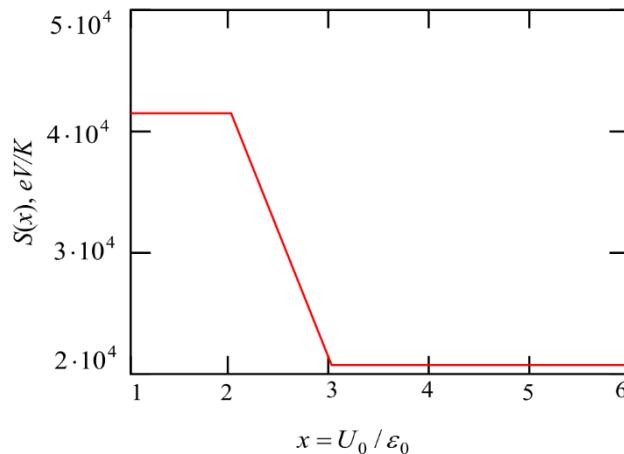


Fig. 4. Entropy of degenerate two-dimensional electron gas vs. the quantum well parameter.

Thermodynamic characteristics reproduce the density of states behavior at the Fermi level. Dependence of thermodynamic characteristics on the concentration and quantum well parameters is determined by a relationship between the Fermi level, quantum well height and first film energy level. Features of thermodynamic characteristics are observed when the Fermi level crosses the size-quantized level. Entropy nonmonotonously depends on the quantum well height, at the specific ratio of the quantum well height to the first film level energy, entropy drastically drops. The entropy drop is due to the strong localization of electrons as the quantum well height becomes significantly larger than the film level energy and electrons pull into the well, therewithal ordering of the system grows.

It is obvious that entropy of a degenerate quasi-two-dimensional electron gas in a magnetic field oscillates in accordance with the behaviour of the density of states.

On the basis of numerical calculations by formula is constructed (10) the dependence of the ratio of entropy of a two-dimensional degenerate electron gas to entropy of a three-

dimensional gas depending on the magnitude a magnetic field (Fig.5) on the degree of band filling (Fig.6). The parameters $a = 10 \text{ nm}$, $m_{\perp} = 0.067m_0$, $\varepsilon_0 = 0.1 \text{ meV}$ for the $Ga_xAl_{1-x}As$ superlattices are used [4].

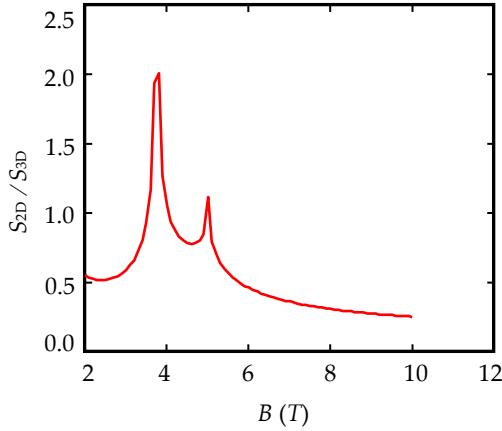


Fig.5. Ratio of entropy of a two-dimensional degenerate electron gas to entropy of a three-dimensional gas vs. a magnetic field.

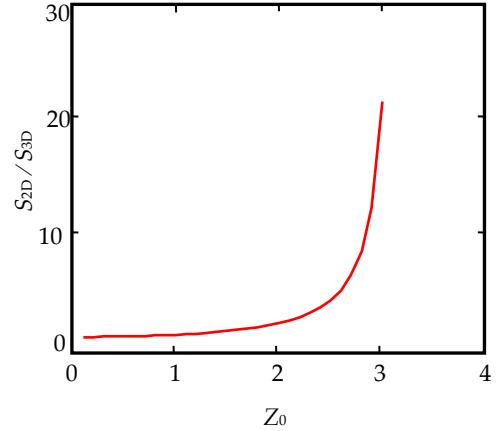


Fig.6. Ratio of entropy of a two-dimensional degenerate electron gas to entropy of a three-dimensional gas vs. the degree of band filling.

From the Figures, it is seen that depending on the magnetic field, entropy oscillates and in the quantum limit, the entropy of a two-dimensional electron gas S becomes larger than the entropy of a three-dimensional electron gas:

$$\frac{S_{2D}}{S_{3D}} = 2 \frac{m_{II0}}{m_{\perp}} \quad (13)$$

where $(m_{II0})^{-1} = \varepsilon_0 a^2 / \hbar^2$ is the longitudinal component of the effective mass.

This fact, apparently, is connected by the fact that the radius of a cyclotron orbit in a two-dimensional case is larger (since $m_{II} > m_{\perp}$). Therefore cyclotron orbits are crossed and the confusion in a two dimensional gas becomes larger.

4. Magnetization

Magnetization in the case of a degenerate electron gas is directly proportional to the density of states, too.

The magnetization of the electron gas can be found from the large thermodynamic potential (8) by the formula [13]

$$M = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial B} \right)_{TV\zeta} \quad (14)$$

In the quantum limit ($N=0$) for the diamagnetic magnetization of a degenerate electron gas, we have [5]:

$$M = \frac{\varepsilon_{02}}{2a\pi^2 R_B^2 B} \left(\sin Z_0 - 2Z_0 \cos Z_0 - \frac{\mu B}{\varepsilon_{02}} \operatorname{ctg} Z_0 \right) \quad (15)$$

where

$$Z_0 = \arccos\left(1 - \frac{\mu B(2N+1) - \zeta_F}{\varepsilon_{02}}\right) \quad (16)$$

here ζ_F is the Fermi level in a magnetic field at $T=0K$ (see (11)). Based on formulas (15) and (16), the dependence of the magnetization on the degree of filling and the magnetic field is plotted Fig.7 and Fig.8. From the Fig.7, it is seen that diamagnetic magnetization of a

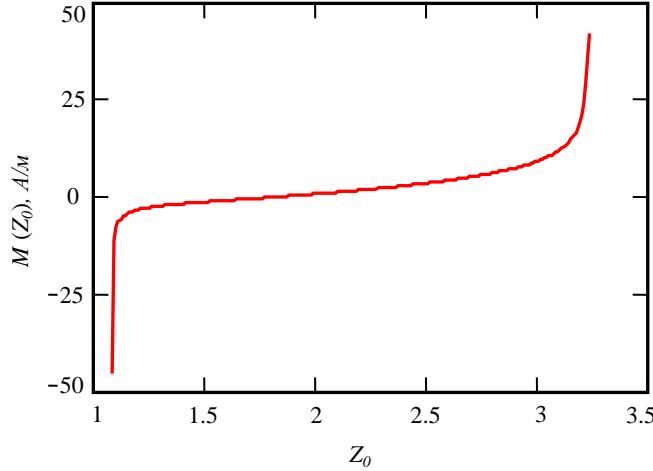


Fig. 7. Diamagnetic magnetization of a degenerate quasi-two-dimensional electron gas versus the degree of band filling at the following parameters: $\varepsilon_{02} = 1 \text{ meV}$, $a = 10 \text{ nm}$, $m_\perp = 0.1m_0$, $n = 10^{23} \text{ m}^{-3}$.

quasi-two-dimensional electron gas depending on the degree of band filling changes the sign and in the two-dimensional case becomes positive. In a magnetic field, magnetization oscillates (see Fig.8).

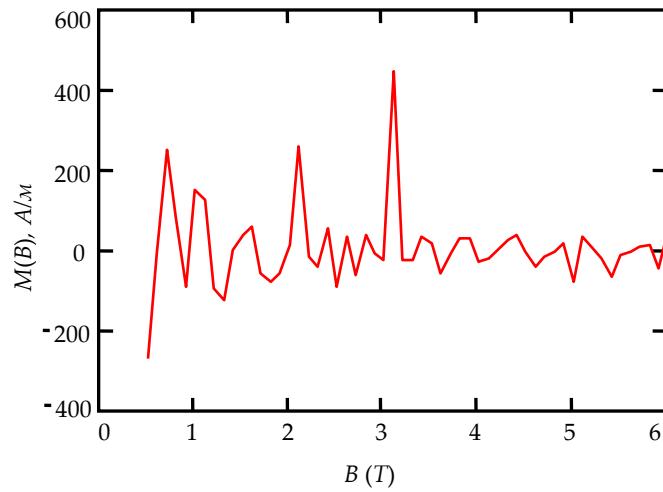


Fig. 8. Diamagnetic magnetization of a degenerate quasi-two-dimensional electron gas versus the magnetic field at the following parameters: $\varepsilon_0 = 1 \text{ meV}$, $a = 10 \text{ nm}$, $m_\perp = 0.1m_0$, $n = 10^{23} \text{ m}^{-3}$.

Such a behaviour of magnetization in superlattices is explained by existence of a negative-effective-mass region in the mini-band. Therewith a conduction electron moves in the direction opposite to the free electron motion. In a magnetic field the conduction electron rotates in the opposite direction; this fact leads to the positive magnetization [10].

The magnetization also reverses the sign in a magnetic field. The magnetization oscillates in the magnetic field; frequencies and amplitudes of these oscillations tend to decrease with a rise in the field. The shape of magnetization oscillations (peak positions, amplitude and frequency) is determined by the relationship between the Fermi level, Landau level and mini-band width of the superlattice. The sign change of magnetization in superlattices was observed in the experimental work [16]. The sign change essentially influences optical phenomena.

Turning the diamagnetic magnetization into zero at specified values of the degree of band filling and magnetic field magnitude can be used when experimentally determining other components of the magnetic susceptibility.

5. Thermopower

Thermopower is determined by entropy from the formula [13]:

$$\alpha = -\frac{S}{en_{el}} \quad (17)$$

the behaviour of the thermopower is completely determined by the density of states. Thermopower of quantum wells and superlattices oscillates in a strong magnetic field [8]. Such a behaviour of thermopower was experimentally confirmed in superlattices of the *GaAlAs* type at low temperatures [17]. Using the formula (10) it can be shown that the thermopower of a two-dimensional electron gas is expressed through the density of states and is as follows:

$$\alpha = -\frac{\pi^2}{3} \frac{1}{en_{el}} k_0^2 T g_{2D}(\zeta_F) \quad (18)$$

here $g_{2D}(\zeta_F)$ is defined by the formula (4) and (6), accordingly. The density of state function is a step function, so the thermopower of thin wells changes with a jump and takes the following form [18]:

$$\alpha = -\frac{\pi^2}{3} \frac{1}{en_{el}} k_0^2 T \frac{m}{\pi \hbar^2 a} \sum_{n=0}^{\bar{n}} \Theta \left[\zeta_F - \varepsilon_{01} \left(1 + 2n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_{01}}} \right)^2 \right] \quad (19)$$

Based on formulas (18) and (19), the dependence of the magnetization on the degree of filling, quantum well parameter and the magnetic field is plotted Fig.9, Fig.10 and Fig.11.

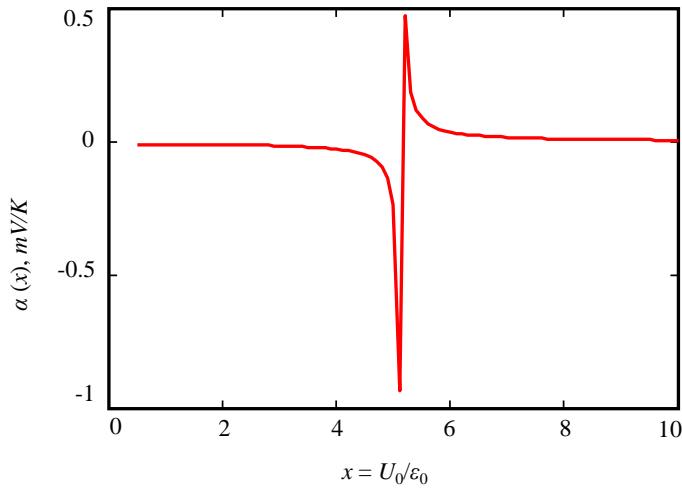


Fig. 9. Dependence of the thermoelectric driving force of a degenerate two-dimensional electron gas on the x quantum well parameter.

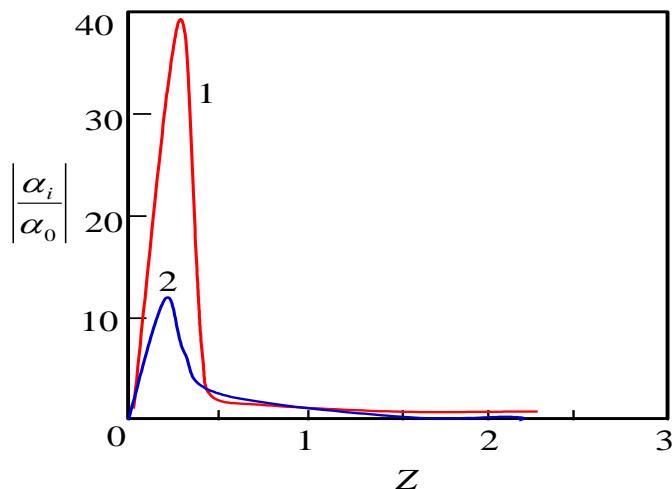


Fig. 10. Dependence of thermopower $|\alpha_i/\alpha_0|$ on the degree of zone filling Z :
1 - transverse thermopower; 2- longitudinal thermopower.

It can be seen from Fig.9 that the thermopower decreases to zero when the Fermi level is located in a localized region. At this time, all the states located below the Fermi level are localized and the temperatures at the boundaries of the well become equal.

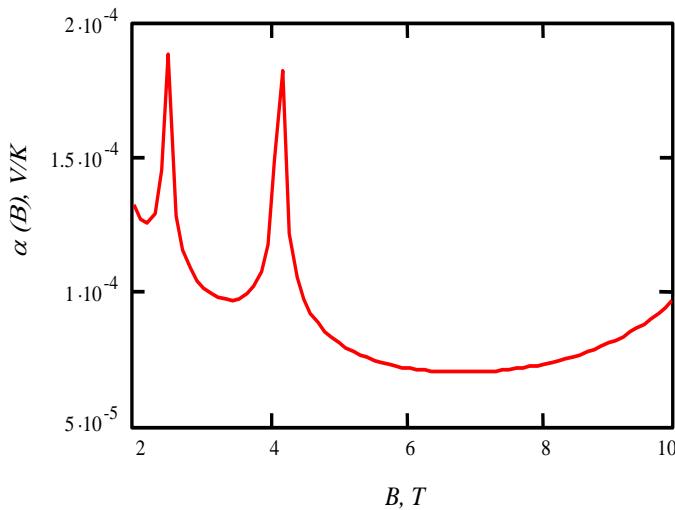


Fig. 11. Dependence of the thermopower of a degenerate quasi-two-dimensional electron gas on the magnetic field at $\zeta_F < 2\epsilon_{02}$.

In a quantum well, the thermopower increases significantly relative to the three-dimensional gas. The physical reason for the increase in thermopower is explained by the fact that the temperature and heat energy in the area under consideration is smaller than the distance between energy and energy that are close to it. Such narrow energy subbands are equivalent to energy bands, which in turn makes the entropy practically independent of temperature. On the basis of the formula (18), a numerical calculation was made of the dependence of the longitudinal and transverse thermoelectric power on the degree of zone filling at a temperature of $T = 4K$. The results of the numerical calculation are shown in Fig.10.

The calculation was made for the $GaAs/Al_{0.36}Ga_{0.64}As$ superlattice parameters with $c\epsilon_{02} = 12.5 \text{ meV}$. The anisotropy of the thermopower was discovered experimentally, and the longitudinal thermoelectric power in absolute value is much less than the transverse one in the Si/Ge superlattice.

Such a nonmonotonic behavior of the thermopower in layered systems was first pointed out in [8]. On Fig.11 dependence of the thermopower on the magnetic field is given. It can be seen from it that the thermopower oscillates in a strong magnetic field.

It should be noted that the amplitudes of the peaks at different ratios between and differ greatly. When the condition is met, the absolute value of the thermoelectric power is greater than when. The periods of oscillations in these cases also differ from each other.

6. Conclusion

In this paper, we consider in detail the dependence of entropy, heat capacity, magnetization and thermopower on the density of states in quantum wells of various profiles and in superlattices in a quantizing magnetic field. It is shown that as the electron gas dimension decreases in a strong magnetic field the entropy increases, which is due to the strong anisotropy of the effective mass, and also to the fact that the cyclotron orbits intersect and therefore the chaoticity of the two-dimensional electron gas becomes much greater. It is found that the superlattice magnetization oscillates and, depending on the degree of filling of the miniband, becomes positive, which is related to the negative effective mass. The reversal

of the sign of the magnetization of *GaAs/AlGaAs* superlattices has been observed experimentally [16]. The thermoelectric power of a two-dimensional electron gas is much greater than the thermoelectric power of a three-dimensional electron gas and changes its sign depending on the degree of occupation of the miniband and the position of the Fermi level relative to the size-quantized levels of the quantum well. The anisotropy of thermopower was discovered experimentally [6].

REFERENCES

- [1] David K. Ferry, Stephen M. Goodnick, Jonathan Bird. *Transport in Nanostructures*. Cambridge University Press, 2009. 670 p.
- [2] Vagner I.D. Thermodynamics of two-dimensional electrons on Landau levels. *HIT Journal of Science and Engineering A*, Vol. 3, Iss. 1, p. 102-152, 2006
- [3] Herman M.A. *Semiconductor Superlattices*, Akademie-Verlag, Berlin, 1986. 269 p.
- [4] Askerov B.M., S.R.Figarova S.R., Mahmudov M.M., Figarov V.R. Entropy of Superlattices in a Quantized Magnetic Field. *Jap. J. Appl. Phys.*, 50, p. 05FE10-1 - 05FE10-2, 2011
- [5] Askerov B.M., Figarova S.R., Mahmudov M.M., Figarov V.R. Diamagnetism of an electron gas in superlattices. *Proc. Royal Soc. A*, Vol. 464, Iss. 2100, p. 3213-3218, 2008
- [6] Broido D.A., Reinecke T. L. Thermoelectric transport in quantum well superlattices. *Applied Physics Letters*, Vol. 70, p. 2834-2836, 1997
- [7] Lyo S.K. High-magnetic-field thermopower in a layered superlattice. *Physical Review B*, Vol. 30, No. 6, p. 3257-3260, 1984
- [8] Askerov B.M., Figarova S.R., Figarov V.R. Anisotropy of the thermoelectric power in superlattices. *Nanotechnology*, Vol. 18, No. 42, p. 424024 (3pp), 2007
- [9] Davies. J.H. *The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction*. Cambridge University Press, 1998. 460 p.
- [10] Jonsson B., Eng S.T. Solving the Schrodinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. 26, No. 11, p. 2025-2035, 1990
- [11] Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. Москва: Мир, 1985. 416 с.
- [12] Шик А.Я., Бакуева Л.Г., Мусихин С.Ф., Рыков С.А. Физика низкоразмерных систем. Санкт-Петербург: Наука, 2001. 160 с.
- [13] Askerov B.M., Figarova S.R. *Thermodynamics, Gibbs Method and Statistical Physics of Electron Gases*. Berlin: Springer Verlag, 2010. 374 p.
- [14] Figarova S.R., Hasiyeva G.N., Figarov V.R. Thermodynamic properties of electron gas in complex-shaped quantum well. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 69, p. 24-26, 2015,
- [15] Аскеров Б.М., Фигарова С.Р., Махмудов М.М., Хасиева Г.Н. Уравнение состояния электронного газа в квантовой яме сложной формы. *Вестник Бакинского Университета, серия физико-математических наук*, №2, с. 93-99, 2014
- [16] Lin Y.-L., Nori F. Quantum interference from sums over closed paths for electrons on a three-dimensional lattice in a magnetic field: total energy, magnetic moment, and orbital susceptibility. *Phys. Rev. B*, Vol. 53, Iss. 20, p. 13374-13385, 1996
- [17] Fletcher R., D'Iorio M., Moore W.T., Stoner R. A search for trends in the thermopower of *GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs* heterojunctions. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, Vol. 21, No. 14, p. 2681-2694, 1988
- [18] Figarov S.R., Mahmudov M.M., Xasiyeva G.N. İkiönlülü elektron qazinin termoelektrik hərəkət qüvvəsinə mürəkkəb formalı kvant çuxuru parametrlərinin təsiri. *Elmi əsərlər, Fizika*. № 2, s. 37-44, 2016

*PACS 25.40-Ep**IOT 539.12-17*

CAPTURE OF NUCLEON CLUSTERS BY PROTON

ABDULVAHABOVA S.G.

Baku State University

sajida.gafar@gmail.com

ABSTRACT

In this paper, in the impulsive approximation with distorted waves the capture of nucleon clusters by a proton is studied. The interaction potential between nucleons is local, short-range. It was assumed that the scattering matrix does not depend on the value of the transferred momentum and spin variables. It is shown that at high energies and large transferred momenta it is possible to obtain the wave function of the mutual motion of the cluster and the residual nucleus. The effective cross section of the process quite accurately describes the knocking out of nucleon clusters formed on the surface of the nucleus.

Keywords: scattering, momentum approximation, distorted waves, nucleon cluster, effective cross section

ЗАХВАТ НУКЛОННЫХ КЛАСТЕРОВ ПРОТОНОМ

РЕЗЮМЕ

В работе в импульсном приближении с искаженными волнами исследуется захват нуклонных кластеров протоном. Потенциал взаимодействия между нуклонами локальный, короткодействующий. Предполагалось, что матрица рассеяния не зависит от значения переданных импульсной и спиновой переменных. Показано, что при высоких энергиях и больших переданных импульсах можно получить волновую функцию взаимного движения кластера и остаточного ядра. Эффективное сечение процесса достаточно точно описывает выбивание нуклонных кластеров, образующихся на поверхность ядра.

Ключевые слова: рассеяние, импульсное приближение, искаженные волны, кластер нуклонов, эффективное сечение.

NUKLON KLASTERLƏRİNİN PROTON TƏRƏFİNDƏN ZƏVTİ

XÜLASƏ

Nuklon klasterlərinin proton tərəfindən tutulması təhrif olunmuş dalğalarla impuls yaxınlaşmasında öyrənilir. Nuklonlar arasında qarşılıqlı təsir potensialı yerli, qısa təsir edəndir. Səpilmə matrisinin ötürünlən impuls və spin dəyişənlərinin qiymətindən asılı olmadığı qəbul edilir. Göstərilmişdir ki, yüksək enerjilərdə və böyük impuls ötürmələrində klaster və son nüvənin qarşılıqlı hərəkətinin dalğa funksiyasını almaq mümkündür. Prosesin effektiv kəsiyi nüvənin səthində əmələ gələn nuklon klasterlərinin vurulub çıxarılmasını olduqca dəqiq təsvir edir.

Açar sözlər: səpilmə, impuls yaxınlaşması, təhrif olunmuş dalğalar, nuklon klasteri, effektiv kəsik.

1. Введение

The study of nucleon clusters has led to the accumulation of materials that require detailed analysis and scientific understanding. For many years, the experience of developing theoretical concepts about these processes has had and continues to have a significant impact on the development of the theory of the cluster structure of nuclei and methods for describing nuclear reactions [1].

The idea of nucleons clustering has a history back to the early thirties of the last century. By observing alpha decay from nucleus, people speculated that nuclei are made up of alpha

particles. Bethe in his paper [2, 3r] predicted that nuclei are made of alpha particles and gave also a geometrical arrangement of alpha particles inside nuclei. He predicted that, for each new addition of alpha particles, the number of bonds increased is three. At that time, this was too a big challenge for the clustering models and eventually these models disappeared from the nuclear structure theories. Clustering is a recurrent feature in light nuclei, from beryllium to nickel. In light nuclei, the nucleons have been observed to cluster together forming substructures within the atomic nucleus, for states where the nucleons are only just bound together. Cluster structures are typically observed as excited states close to the corresponding decay threshold; the origin of this phenomenon lies in the effective nuclear interaction, but the detailed mechanism of clustering in nuclei has not yet been fully understood. If we are taking into account the interaction between nucleons in the model approach, we can expect the formation of clusters.

In this paper, we consider processes with the capture of a proton of nucleon clusters in the impulse approximation with distorted waves.

2. Scattering matrix equation

The impulse approximation is often used to describe the scattering of particles by nuclei. The momentum approximation is applicable if the energy of the incident nucleon is much greater than the binding energy of individual nucleons in the nucleus. To simplify the many-particle problem, it is assumed that the incident nucleon interacts with only one nucleon of the nucleus at a time. In this case, the collision can be regarded as a short impact, during which the forces binding the impacted nucleon to the nucleus play no role. Thus, during the time of interaction, the impacted nucleon can be considered "free", and the binding forces in the nucleus determine only the momentum distribution function of nucleons. In the momentum approximation, the cross section of any process of interaction of a nucleon with a nucleus is expressed in terms of the amplitude of the scattering of a nucleon by an individual nucleon. It is also assumed that the scattering of a nucleon by any nucleon of the target nucleus is not affected by the presence of other nucleons in the nucleus.

Consider the scattering of a proton p on the nucleus A and the reaction occurs, $A(p, X)B$ where $B = A - X$. We will assume that the potential consists of two parts: the interaction of the proton with all nucleons of the X association and the potential that determines the interaction of the nucleons of the X association with other nucleons of the nucleus. The potentials are local, short-range and weakly singular: $r^2 V(r) \rightarrow 0$ at $r \rightarrow 0$.

We choose the wave function of the initial system in the form:

$$\Psi_i = e^{k_0 r_0} \psi(J_i M_{J_i} T_i M_{T_i}), \quad (1)$$

where $k_0 = p_0 / \hbar$ is the wave number of the proton, and $\psi(J_i M_{J_i} T_i M_{T_i})$ is the internal wave function of the target nucleus with total momentum J_i and isospin T_i .

For the wave function of the final state, we have

$$\Psi_f = e^{ik_X r_X} e^{iq r_{A-X}} \varphi(J_X M_{J_X} T_X M_{T_X}) \phi(J_f M_{J_f} T_{T_X}). \quad (2)$$

Here, $\varphi(J_X M_{J_X} T_X M_{T_X})$ the internal wave function of the cluster X , $\phi(J_f M_{J_f} T_{T_X})$ the wave function of the final nucleus $A-X$, r_X and r_{A-X} are the coordinates of the centers of mass

of these nuclei, \mathbf{q} is the momentum of the relative motion of the association X and the final nucleus.

The Schrödinger equation for this system has the form:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_p - \frac{\hbar^2}{2m_X} \Delta_X + V(r_1) + U(r_2) \right] \Psi(r_1 r_2) = E \Psi(r_1 r_2), \quad (3)$$

where

$$E = \frac{p_p^2}{2m_p} + \frac{p_X^2}{2m_X} - \varepsilon_{ce}, \quad (4)$$

and ε_{ce} is the binding energy of the X association in the initial nucleus A .

We will calculate the matrix element of the process using the method of distorted waves [4.r]. By the method of distorted waves, which takes into account the finite radius of interaction between particles, we mean the following method for calculating the matrix element. When the interactions responsible for the rearrangement of the system from initial to final are taken the same as in the three-body problem, and the interactions of the initial and final particles with the corresponding nuclei are described in the optical model approximation, i.e. in the approximation of the two-body problem. In this case, only elastic scattering by the complex potential is taken into account.

In the distorted wave approximation, the exact wave function is replaced by $\Psi(r_1 r_2)$

$$\Psi(r_1 r_2) \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \iint dK dr \varphi_B(r) \psi_X(r_X), \quad (5)$$

где $\psi_X(r_X)$ описывает рассеяние кластера с импульсом k_X , $\varphi_B(r)$ волновая функция конечного ядра.

In the approximation of distorted waves, the scattering matrix element has the following form [5]

$$M = \frac{1}{(2\pi)^6} \int e^{i(k_p - k_B - k_X)r_p} \psi_B^*(r) \psi_X^*(r_X) \psi_A(r) (k_X |(V(r) + U(r))| k_p) dr dk_p dk_X. \quad (6)$$

This expression is valid over the entire range of scattering angles and can be considered as a generalization of the momentum approximation for the scattering amplitude. It can be expected that the impulse approximation will be the best approximation, since the matrix element (5) contains a singular interaction. If, as a first approximation, we assume that the matrix element does not depend on spin variables, then expression (5) can be easily calculated.

The square of the matrix element (5) with distorted waves has the following form:

$$\frac{d\sigma}{dp_p dp_X dp_q} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \frac{m_p}{q_p} |\overline{R(q)}|^2 \delta(q_p - q_X - q_B) \delta(E_i - E_f) \sum_{\Lambda'} \beta_{if\Lambda\Lambda'}^2, \quad (7)$$

where

$$\beta_{if\Lambda\Lambda'} = \left\langle A - X, J_f M_{J_f} T_{T_f}, X J_X M_X T_X \mid e^{iq(r_{A-X} - r_X)}; AJ_i M_i T_i \right\rangle, \quad (8)$$

is a factor determined by the structure of the nucleus. Integral (7) is nonzero only in the case when the law of conservation of the moment of quantity is satisfied, namely, the vector sum of three moments J_f , J_X and Λ must be equal to J_i , where Λ is the moment of momentum carried away by the cluster. $R(q)$ in (6) is a function that characterizes the momentum distribution of the cluster in the initial core. This is essentially the Fourier component of the function of the relative motion of the cluster in the initial core, i.e. the association form factor X in the given nucleus relative to some level $|f\rangle$ of the finite nucleus B .

Formula (6) determines the general scheme for calculating the differential cross section of the process under consideration. A characteristic feature of the approximation used is the division of its methodological basis into two main parts. The first part refers to the theory of nuclear reactions, since it consists in choosing an approximation for (5) that determines the reaction mechanism. The second part refers to the theory of nuclear structure, which contains information about the spectrum of the final nucleus.

3. Conclusion

Formula (6) for the reaction cross section $A(p, pX)A-X$ was obtained in the impulse approximation with distorted waves. It was assumed that the scattering matrix does not depend on the recoil momentum q and spin variables. But the study showed that taking into account wave distortions does not change the shape of the impulse distributions. It should be noted that the most vulnerable from the point of view of theoretical substantiation of the method of distorted waves is the fact that it is a semi-empirical method. Therefore, within the framework of this method, it is impossible to predict the values of the reaction cross sections with a sufficient degree of accuracy.

The processes of knocking out nucleon clusters usually make a relatively small contribution to the total probability of interaction, but are distinguished by the exceptional simplicity of the interaction mechanism.

REFERENCES:

1. Kadmensky S.G. Kurgalin S.D., Chuvilsky Yu.M. *Cluster states of atomic nuclei and processes of cluster decay*. Fiz. Élem. Chast. At. Yad., 2007, Vol.38, Issue 6, p. 1333.
2. Freer M. Clusters in nuclei. *Scholarpedia*. 2010, 5 (6): 9652.
3. Neudachin V.G., Struzhko B.G., Lebedev V.M. *Supermultiplet potential model of the interaction of the lightest clusters and a unified description of various nuclear reactions*. Fiz. Élem. Chast. At. Yad., 2005, Volume 36, Issue 4, p. 889.
4. Zelenskaya N.S., Teplov I.M. *Method of distorted waves in reactions with complex particles*. Fiz. Élem. Chast. At. Yad, 1979, Volume 11, Issue 2, p. 342.
5. Abdulvagabova S.K., Rasulov E.A. *Scattering of nucleons on nuclei with knocking out of nucleon associations*. Journal of Qafqaz University" 2011, N.31, p.39.

PACS 25.40-Ep**УДК 531.1**

POLARIZATION EFFECTS AND AZIMUTHAL SYMMETRY IN SCATTERING PROCESSES

I.G. AFANDIYEVA, R.A.AHMEDOV

Azerbaijan State University of Oil and Industry

Baku / Azerbaijan

irada.e@mail.ru

ABSTRACT

The polarization effects and azimuthal scattering of nucleons at high energies have been studied. The unitarity condition was used to determine the scattering amplitudes. The amplitude depends on two terms: on the spin-independent interaction and on the spin-orienting interaction. The polarization effect essentially depends on the relative value of the amplitude terms. The polarization disappears if one of these terms is zero. An analysis of the azimuthal symmetry properties makes it possible to obtain a general form of the scattering amplitude and to establish a number of important features of the scattering process. In particular, the phenomenon of polarization of particles during scattering finds a fairly complete explanation within the framework of a theoretical consideration based on an analysis of only the properties of the invariance of the scattering amplitude.

Key words: scattering, polarization, azimuthal symmetry, spin-orbit interaction

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ И АЗИМУТАЛЬНАЯ СИММЕТРИЯ В ПРОЦЕССАХ РАССЕЯНИЯ РЕЗЮМЕ

Исследованы поляризационные эффекты и азимутальное рассеяние нуклонов при высоких энергиях. Условие унитарности использовалось для определения амплитуд рассеяния. Амплитуда зависит от двух членов: от спин-независимого взаимодействия и от спин-ориентирующего взаимодействия и эффект поляризации существенно зависит от относительного значения членов амплитуды. Поляризация исчезает, если один из этих членов равен нулю. Анализ свойств азимутальной симметрии позволяет получить общий вид амплитуды рассеяния и установить ряд важных особенностей процесса рассеяния. В частности, явление поляризации частиц при рассеянии находит достаточно полное объяснение в рамках теоретического рассмотрения, основанного на анализе только свойств инвариантности амплитуды рассеяния.

Ключевые слова: рассеяние, поляризация, азимутальная симметрия, спин-орбитальное взаимодействия

SƏPİLMƏ PROSESLƏRINDƏ POLYARIAŞMA EFFEKTLƏRİ VƏ AZİMUTAL SIMMETRIYA XÜLASƏ

Yüksək enerjilərdə polyarlaşma effektləri və nuklonların azimutal səpilməsi tədqiq edilir. Səpilmə amplitudunu təyin etmək üçün unitarlıq şərtindən istifadə edilmişdir. Amplitud iki həddən asılıdır: spindən asılı olmayan qarşılıqlı təsirdən və spin yönümlü qarşılıqlı təsirdən və polyarlaşma effekti mahiyətəcə amplitudun hədərinin nisbi qiymətindən asılıdır. Bu hədlərdən biri sıfır olarsa polyarlaşma yox olur. Azimutal simmetriyanın təhlili səpilmə amplitudunun ümumi ifadəsini əldə etməyə və səpilmə prosesinin bir sıra mühüm xüsusiyyətlərini təyin etməyə imkan verir. Xüsusilə, səpilmə zamanı zərrəciklərin polyarlaşma hadisəsi yalnız səpilmə amplitudunun invariantlıq xassələrinin təhlilinə əsaslanan nəzəri mülahizə çərçivəsində kifayət qədər dolğun izahat tapır.

Açar sözlər: səpilmə, polyarlaşma, azimutal simmetriya, spin-orbital qarşılıqlı təsir

1. Introduction

Due to the spin dependence of the interaction, the scattering cross section can depend on the polarization of the incident particle and on the polarization of the target.

A particle with non-zero rest mass and spin J has $2J+1$ quantum states corresponding to the different spin orientations (different values of spin projection onto some direction). The particle state is a superposition of these states. If the superposition coefficients are completely determined, then the particle is said to be completely polarized. If the superposition coefficients are not completely determined, but are given only by some statistical characteristics, then one speaks of partial polarization. In particular, the particle may be completely unpolarized; this means that its properties are the same in all directions, like a spinless (with $J = 0$) particle. In the general case, the polarization of particles determines the degree of their symmetry (or asymmetry) in space.

In this article, we will consider the polarization function and azimuthal scattering of nucleon at high energies.

2. The expression for the polarization function and the azimuthal scattering

Many theoretical and experimental studies have been carried out on the scattering of both neutrons and protons show that an almost complete polarization of the scattered particles is observed. The polarization effect is a consequence of the fact that the nuclear interaction can be represented as a complex spin-dependent potential. When unpolarized nucleons pass through a nucleus, in directions where the interaction cross section is smaller, polarization of nucleons will be observed in this direction. The analysis shows that, if interaction nucleons with nucleus depend on the spin and the polarization of nucleon and target will be different from each other. As a result of the spin dependence, the scattering interaction cross section can depend on the polarization of the interacting systems.

The polarization effects usually are used for investigation spin-dependent interactions in the scattering processes and for checking the used model. Polarization of particles scattered from unpolarized nuclei can occur due to the spin - orbit interaction between the incident particle and the nuclei [1]. The theoretical analysis of the polarization effects in the scattering of hadrons showed that, in addition to the central interactions, must be considered also a spin-orbit interaction.

Under the assumption that at high energies of incident nucleon, the kinetic energy of the nucleon is large in comparison with the binding energies of the nucleons, the interaction of the nucleon with the nucleons of the nucleus can be treated independently. With each nucleon, the nucleon interacts only once. For the high- energy scattering we will consider only nuclear potential, and don't consider magnetic interaction. To determine the polarization, it is necessary to determine the scattering amplitudes using the unitarity condition.

Particle with a spin J has $2J+1$ quantum states corresponding to different spin orientations of the particle. The state of a particle is superposition of these states. If the particle completely polarized to mean superposition coefficients of these states are completely determined. If the superposition coefficients are specified only by certain statistical characteristics, then particle has partial polarization. The particle can be completely unpolarized when these coefficients are not determined.

The scattering amplitude operator has the following general form [2]:

$$f(E, \theta) = A(E, \theta) + B(E, \theta)(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}), \quad (1)$$

where \vec{n} is the unit vector of the normal to the scattering plane. In (1), the first term corresponds to the interaction that does not depend on the spin, and the second term corresponds to the interaction that causes spin reorientation. The explicit form of the functions $A(E, \theta)$ and $B(E, \theta)$ is determined by the specifics of the interaction.

Taking into account the spin-orbit interaction, in the Born approximation, in the momentum representation $A(E, \theta)$ and $B(E, \theta)$ has the following form:

$$A(k', k, \theta) = \frac{i}{2} \frac{\hbar^2 k^2}{\mu^2 c^2} \sin \theta \int dr \exp[-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')r] V(r), \quad (2)$$

$$B(k, k', \theta) = -\frac{ik}{2\pi} \int dr \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')r] \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} dr. \quad (3)$$

The differential scattering cross section is given by the formula

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |\langle \Psi_f^* | f(E, \theta) | \Psi_i \rangle|^2 = |A(E, \theta) \delta_{if} + \langle \Psi_f^* | \vec{n} \cdot \vec{\sigma} | \Psi_i \rangle|^2. \quad (4)$$

Let us assume that the incident particle is in a state with a certain value of the spin projection m_s onto the z axis. In this case, the polarization vector of scattered particles is equal to

$$P = \frac{\langle \Psi_{m_s}^* | f^* \cdot \hat{\sigma} f | \Psi_{m_s} \rangle}{\langle \Psi_{m_s}^* | f^* f | \Psi_{m_s} \rangle}. \quad (5)$$

Let now different values of m_s be represented in the incident beam with the same probabilities, i.e. the polarization vector of bombarding particles is equal to zero. In this case, to calculate the polarization vector P of scattered particles, it is necessary to average the vector P_{ms} , taking into account the equal statistical weights of different projections of the spin m_s in the initial state:

$$P^{(0)} = \frac{2 \operatorname{Re}(A^*(E, \theta) B(E, \theta))}{|A(E, \theta)|^2 + |B(E, \theta)|^2} \vec{n}. \quad (6)$$

So, as a result of the scattering of an initially unpolarized particle with spin $s = 1/2$ on spinless nucleus, generally speaking, the particle are polarized. It depends on the particle energy E and the scattering angle θ . In this case, the polarization vector P is always directed perpendicular to the scattering plane, and its absolute value depends significantly on the value of $\operatorname{Re}(A^*(E, \theta) B(E, \theta))$. The polarization effect essentially depends on the relative phase of the amplitudes $A(E, \theta)$ and $B(E, \theta)$ and vanishes if one of them is equal to zero.

The scattering of partially polarized particles is azimuthally asymmetric; the condition for the occurrence of azimuthal asymmetry is the presence of interference between the scattering amplitudes $A(E, \theta)$ and $B(E, \theta)$:

$$\operatorname{Re}[A^*(E, \theta) \cdot B(E, \theta)] \neq 0. \quad (7)$$

The spin state of a particle with spin $s = 1/2$ is characterized by a 2×2 density matrix:

$$\hat{\rho} = \frac{(1 + \vec{P}\hat{\sigma})}{2}, \quad (8)$$

where $\hat{\sigma}$ is the spin operator, and \vec{P} is a numerical vector indicating the mean direction and mean value of the particle spin vector in the considered state. The module of this vector $P = |\vec{P}|$ is the degree of polarization of the particle. Only at $P = 1$ does the density matrix (8) satisfy the criterion of a pure state, and in this case the spin state of the particle can be described by some single wave function. In the opposite case, when $P = 0$, the spin density matrix (8) is proportional to the identity matrix. Such a density matrix describes an unpolarized system: no direction in space is singled out with respect to any spin characteristics of the state. In the intermediate case $0 < P < 1$, we are dealing with a partially polarized system. In all cases, except for $P=1$, the spin state of the particle is mixed.

Let the matrices

$$\hat{\rho}_i = \frac{(1 + \vec{P}_i\hat{\sigma})}{2} \quad (9)$$

and

$$\hat{\rho}_f = \frac{(1 + \vec{P}_f\hat{\sigma})}{2}, \quad (10)$$

characterize the spin state of the particles before and after the collision. According to the general rules, the density matrix of the final state f can be expressed in terms of the density matrix of the initial state i by the formula

$$\rho_f = \hat{f}\rho_i\hat{f}^+. \quad (11)$$

It is seen from (11) that the component of the polarization vector of incident particles lying in the scattering plane does not make any contribution to the scattering.

The differential scattering cross section of particles, regardless of their polarization in the final state, is given by [3]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = Sp\hat{f}\rho_i\hat{f}^+. \quad (12)$$

Concedering (10) and (8)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(E, \theta)|^2 + |B(E, \theta)|^2 + 2 \operatorname{Re}[A^*(E, \theta) \cdot B(E, \theta)](\vec{n}\vec{P}_i). \quad (13)$$

It can be seen from it that the scattering of partially polarized particles is, azimuthally asymmetric.

The value of the azimuthal scattering symmetry is related to the polarization. Azimuthal asymmetry is extracted from spin-dependent cross sections. The scattering azimuthal asymmetry coefficient has the following form:

$$A(E, \vec{P}_i) = \vec{P}^{(0)}\vec{P}_i = \frac{2 \operatorname{Re}(A^*(E, \theta)B(E, \theta))}{|A(E, \theta)|^2 + |B(E, \theta)|^2}(\vec{n}\vec{P}_i). \quad (14)$$

Taking into account the general form of the density matrix (10), we obtain an expression for the polarization vector of scattered particles:

$$P_f = \frac{\vec{P}^{(0)} \frac{|A(E, \theta)|^2 |\vec{P}_i| + |B(E, \theta)|^2 (\vec{n} \cdot \vec{P}_i) \vec{n}}{|A(E, \theta)|^2 + |B(E, \theta)|^2}}{1 + A(E, \vec{P}_i)}. \quad (15)$$

The polarization sign depends on the value of the incident particle energy. Depending on the energy, there is interference from positive and negative scattering angles and this affects the sign of polarization. It is of interest to study polarization for individual energy regions. This can monitor the change in the polarization sign.

3. Conclusion

Polarization effects are important of studying the structure of particles. The studying shows that studies of nucleon polarization can illuminate some aspects of nuclear structure, since the polarization depends on the particular nucleus used as a target as well as upon the form of the interaction.

A qualitative description of the polarization of nucleons is explained by the spin-orbit interaction. For $s=1/2$, the particle orientation is completely characterized by the polarization vector. If the spin s is distributed symmetrically around the z -axis, which is perpendicular to the reaction plane, the polarization can be expressed in terms of the scattering amplitudes.

The selection of the potential involved in the spin-orbital interaction plays a major role in the calculation of the effective cross section and also the polarization vector [4]. If the optical potential is chosen, optical model potential parameters only from the analysis of the angular distributions of the elastic scattering, in principle, are not feasible because the elastic scattering of particles is determined not only potential scattering. Therefore, it is necessary to use more realistic potentials.

REFERENCES

1. Haque A.K.F. et al. Relativistic calculations for spin-polarization of elastic electron-mercury scattering. *J. Phys. Commun.* 2017, 1 035014, doi:10.1088/2399-6528/aa8bf8.
2. Ahmedov R.A. *Polarization effects in hadron-nuclei scattering at high energy*. Cumhuriyet University Faculty of Science Journal (CSJ), 2016, Vol. 37, p. S56-S58 ISSN: 1300-1949.
3. Abdulvahabova S. G., Afandiyeva I.G., *Polarization effects in scattering with nucleon associations*. Journal of Qafqaz University. Physics. 2015, V.3, N.1: 57-61.
4. Blum Kand B. and Lohmann B. *Entanglement and Bell Correlation in Electron-Exchange Collisions*. *Phys. Rev. Lett.* 2016. 116 033201. doi:10.1103/Phys.Rev.Lett.116.033201.

PACS: 77.22.Ej, 64.75 Bc, 31.70. Dk, 61.70 OgUOT 532

ELEKTROLİTLƏRDƏ HİDRATASIYA PROSESİNİN REFRAKTOMETRİK TƏDQİQİ

E.Ə.MƏSİMOV, B.G.PAŞAYEV, G.M.ŞAHBAZOVA, J.Z.TEYMUROVA

Bakı Dövlət Universiteti,

Bakı, Azərbaycan

masimovspektr@rambler.ru, shahbazova.gunel@mail.ru

XÜLASƏ

İşdə, suda dissosiasiya olunmuş bir sıra duzların ionlarının hidratlaşma ədədlərinin cəminin (h_1+h_2) sadə yolla təyin olunmasının faydalı olduğunu nəzərə alaraq, elektrolitlərin duru məhlullarda refraktometrik metodla $|1| h_1+h_2$ kəmiyyəti hesablanmışdır. Müxtəlif ion cütləri üçün hidratasiya ədədi (h_1+h_2) kationların və anionların radiuslarından, yüklerinin səthi sıxlıqlarından asılı olaraq müxtəlif qiymətlər alır. Bu nəticə müxtəlif cüt ionların hidrofob və hidrofil hidratasiya proseslərində iştiraklarının, suyun strukturunu dəyişdirmək dərəcələrinin yekun nəticəsidir. Eyni zamanda məlum olmuşdur ki, elektrolitlərin suda məhlullarına polimerlər əlavə etdikdə h_1+h_2 parametri azalır. Bu yəqin ki, polimerlərin müxtəlif hidrofob və hidrofil qruplarının su molekulları ilə qarşılıqlı təsirlərin nəticəsidir və ionla polimerlərin su molekulları ilə qarşılıqlı təsirlərinin bir-biri ilə rəqabətləri ilə əlaqədardır.

Açar sözlər: hidratasiya, elektrolitlər, hidratasiya ədədi

REFRACTOMETRIC STUDY OF THE HYDRATION PROCESS IN ELECTROLYTES

ABSTRACT

Taking into account that it is useful to determine the sum of the hydration numbers of dissociated ions (h_1+h_2), as well as in a simple way, the amount of h_1+h_2 was calculated by the refractometric method of electrolytes in dilute solutions. For different ion pairs, the hydration number (h_1+h_2) takes different values depending on the radii of cations and anions, surface densities of their charges. This result is the final result of the participation of different pairs of ions in the hydrophobic and hydrophilic hydration processes, the degrees of changing the structure of water. At the same time, when adding polymers to water solutions of electrolytes, the parameter h_1+h_2 decreases. This is probably the result of interactions of various hydrophobic and hydrophilic groups of polymers with water molecules. It is related to the competition of interactions between ions and polymers with water molecules.

Keywords: hydration, electrolytes, hydration number

РЕФРАКТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГИДРАТАЦИИ В ЭЛЕКТРОЛИТАХ

РЕЗЮМЕ

Нами был предложен простой, рефрактометрический метод определения суммы чисел гидратации диссоциированных в воде ионов (h_1+h_2). Различные значения суммы чисел гидратации ионов связаны величиной заряда, размеров и поверхностной плотности зарядов и является результатом различных гидрофобных и гидрофильных взаимодействий ионов с водой.

Влияние введенных в систему полимеров на величину h_1+h_2 повидимому связано с конкуренцией ионов и молекул полимеров во взаимодействий с водой, с молекулами воды.

Ключевые слова: гидратация, электролиты, число гидратации.

Giriş

Məlumdur ki, maddələrin suda məhlullarında baş verən bütün struktur və energetik dəyişikliklərin əsasında hidratasiya prosesi durur.

Təcrübələr göstərir ki, elektrolitlərin suda məhlullarında dissosiasiyyaya uğramış ionların təsiri nəticəsində iona çox yaxın olan su molekullarının translyasion hərəkətləri (yerdəyişmələri, yürüklükleri) dəyişir. Bəzi hallarda, ionların təbiətindən asılı olaraq, yürüklük artır, bəzi hallarda isə azalır. Sözsüz ki, hər iki halda suyun, ümumilikdə strukturu dəyişir. Translyasion hərəkətlərin dəyişmə istiqaməti və dərəcəsi ionun polyarlaşdırma qabiliyyəti, radiusu və yükünün səthi sıxlığı ilə müəyyənləşir. Kiçik radiuslu, səthi sıxlığı böyük olan ionlar ($\sigma = \frac{q}{s}$) E_{ion-dipol} qarşılıqlı təsir nəticəsində su molekullarının bir hissəsinin yürüklüyünü azaltır, müəyyən mənada özünə bağlayır, bu molekullar hidrat təbəqəsi adlanan təbəqədə yerləşirlər. Bu zaman su molekullarının digər su molekulları ilə mübadilə imkanları azalır, molekulun özünün tarazlıq vəziyyətində (yəni tarazlıq vəziyyəti ətrafında rəqs halında) yaşama müddəti artır, molekulun sıçrayışla digər tarazlıq halına keçmə ehtimalı və kecid tezliyi azalır, radiusu böyük, yükünün səthi sıxlığı kiçik olan ionlar üçün isə, deyilənlərin əksi olan dəyişmələr baş verir – ionətrafi su molekullarının yürüklüyü artır, digər molekullarla mübadilə imkanı artır, kecid üçün lazım olan aktivləşmə enerjiləri azalır, tarazlıq ətrafında yaşama müddəti azalır, iondan uzaqda olan su molekullarının mübadilə tezliyi artır. Bu proseslər, ion-su dipolu qarşılıqlı təsiri və ionla çox yaxın məsafələrdə olan su molekulları arasında mövcud olan Van der-Vaals cazibə qüvvələrinin ionun elektrik sahəsinin hidrogen rabitələri ilə birləşmiş su molekullarının daxilində elektron buludunun sıxlığının paylanması göstərdiyi təsirlər nəticəsində baş verir. Beləliklə, iki hal mövcuddur:

$$a) r \ll; s \ll; \sigma = \frac{q}{s} \gg; \Delta E \gg; \tau \gg; w \ll; \nu_k \ll \text{Su strukturlaşır} \quad (1)$$

$$b) r \gg; s \gg; \sigma \ll; \Delta E \ll; \tau \ll; w \gg; \nu_k \gg \text{Suyun strukturu dağlır}$$

Burada, q , r , s , σ , ΔE , τ , w , ν_k uyğun olaraq ionun yükü, radiusu, səthinin sahəsi, yükün səthi sıxlığı, su molekulunun bir tarazlıq vəziyyətindən digər tarazlıq vəziyyətinə keçmək üçün aktivləşmə enerjisi, tarazlıq (rəqs) halında yaşama müddəti, kecid ehtimalı, kecid tezlikləridir.

Lakin məhlulda hidrataşıya prosesi iona yaxın su molekullarının iona bağlanması ilə bitmir. Deyilənlər, bəzi hallarda qəbul edilməsinə baxmayaraq korrekt deyil. Hidrataşıya prosesi daha mürəkkəb bir prosesdir. Əvvəla qeyd etmək lazımdır ki, iona yaxın molekulların translyasion hərəkətlərinin zəifləməsi və ya güclənməsi məhlulda köçürmə proseslərinin – özlülüyün, diffuziyanın, istilikkeçirmənin, elektrik keçiriciliyinin təmiz suda olan qiymətlərindən fərqli qiymətlərinə gətirir. Yeri gəlmışkən qeyd edər ki, bu dəyişmələr Nobel mükafatı laureatları Bernal və Faulerə [1] elmə strukturlu mayelər üçün çox müvəffəqiyətlə tətbiq olunan “struktur temperaturu” anlayışını daxil etməyə sövq etmişdir. Digər tərəfdən, hidrataşıya prosesi təhlil edildikdə yuxarıda şərh edilən və “yaxın hidrataşıya” adlanan mərhələsi ilə yanaşı bu prosesin tərkib hissəsi olan “uzaq hidrataşıya” adlanan mərhələ nəzərdən qaçırlıkmamalıdır. Belə ki, ionun elektrik sahəsinin su molekullarının daxili sahəsinə təsiri iondan uzaqlaşdıqca tədricən azalır. Bu təsirin iondan hansı məsafədə aradan qalxmasını, nə qədər su molekulunu əhatə etdiyini müəyyənləşdirmək çox mürəkkəbdür. Ona görə bir çox tədqiqatçıların hidrataşıya prosesinə su molekullarının bağlanması kimi baxmaq və hidrataşıya ədədi və ya hidrataşıya dərəcəsini iona bağlanan molekulların sayı (bu say kristallokimyada koordinasiya ədədi adlanır) kimi deyil, bütövlükdə, hidrataşıya prosesini xarakterizə etmək üçün uonun elektrik sahəsinin təsiri (az və ya çox) altında olan molekulların sayı götürülməlidir. Bu kəmiyyətin qiymətinin müxtəlif tədqiqatçılar tərəfindən, müxtəlif metodlarla təyin olunması zamanı əksər hallarda

bir-birindən fərqli qiymətlər alınması (məs., Na^+ ionu üçün 2, 7, 15, 22 və s. qiymətlər alınmışdır) təbii olaraq qəbul edilməlidir, çünkü, hidratisiya ədədinin müxtəlif metodlarla təyin olunan qiymətləri ionun elektrik sahəsinin təsirinin neçə molekulu əhatə etməsindən, bir sözlə, metodlarda tədqiq olunan fiziki kəmiyyətlərin bu təsirə həssaslıqlarından asılıdır. Beləliklə, hesab etmək olar ki, ionun suya təsirini göstəricisi kimi, onu təsiri ilə suyun bütövlükdə strukturunun və ya termodinamik halının dəyişməsinin qəbul edilməsi daha məqsədə uyğundur. Digər tərəfdən iordan uzaq su molekulların daxili sahəsinə ionun elektrik sahəsinin təsiri nəticəsində molekulun elektron buludunun sıxlığının paylanması dəyişir, hidrogen rabitələrinin yaranması üçün lazım olan şərait dəyişir, bu isə suyun strukturunun bütövlükdə dəyişməsi deməkdir. Samoylov [3] suya daxil edilən maddələrin təsirilə suyun strukturunun möhkəmlənməsini, daha da strukturlaşmasını xarakterizə etmək üçün elmə "hidrofob hidratisiya" və ya "müsbat hidratisiya", maddələrin təsirilə suyun strukturunda destrukturlaşmasını, dağıtmasını xarakterizə etmək üçün isə "hidrofil hidratisiya" və ya "mənfi hidratisiya" anlayışlarını daxil etmiş və hal-hazırda da geniş istifadə olunan hidratisiyanın nəzəriyyəsini vermişdir: Bu nəzəriyyə əsasən mayelər üçün ilk nəzəriyyə olan Frenkel [4] nəzəriyyəsinə əsaslanmışdır.

Frenkelə [4] görə, mayelərdə istilik hərəkəti molekulların sıçrayış yolu ilə yerdəyişməlidir. Bu zamansın molekul bir tarazlıq halından (1) digər (2) tarazlıq halına keçmək üçün (Qeyd edək ki, tarazlıq hali dedikdə onun 1 halında süküntədə olmasından getmir, bu hal ətrafında rəqs halından gedir) molekul lazım olan aktivləşmə enerjisini (ΔE) xaotik hərəkətdə olan molekullardan alır, onlarla toqquşmadan alır. Bu enerji molekul 1 halındaki ətrafindan qoparmağa, artıq qalan enerji isə onun hərəkət edərək, iş görərək, 2 halına keçməsinə sərf olunur. Molekul 2 halına düşdükdə həmin enerji ayrılır, əks halda molekul öz əvvəlki yerinə qayıda bilar. Molekulun 1 halından 2 halina keçmə ehtimalı, yəni onun toqquşmalar nəticəsində ΔE -yə bərabər və ondan böyük enerji alma ehtimalı (W) və 1-halında yaşama müddəti (τ) üçün Frenkel aşağıdakı ifadələri almışdır:

$$W \sim N_u \sim Ne^{\frac{\Delta E}{RT}}; \tau = \tau_0 e^{\frac{\Delta E}{RT}} \quad (2)$$

N_u – 1 cm^3 -də enerjisi $E \geq \Delta E$ olan molekulların sayı, N – 1 cm^3 -da olan bütün molekulların sayı, R – universal qaz sabiti, τ_0 , $T=\infty$ olduqda molekulun tarazlıq halında yaşama müddətidir, T – temperaturdur.

Frenkel molekulun tarazlıqda yaşama müddəti ilə mayelərdə diffuziya əmsalı (istiqamətlənmiş və ya məcburi diffuziya) arasında aşağıdakı

$$D = \frac{\delta^2}{6\tau} = \frac{\delta^2}{6\tau_0} e^{-\frac{\Delta E}{RT}} \quad (3)$$

münasibəti almış və özlülüklə diffuziya arasında asılılığı təsvir edən məlum

$$\text{Eynsteyn tənliyindən } \eta = \frac{RT}{6\pi r} \cdot \frac{1}{D} \quad (4)$$

istifadə edərək struktursuz (molekullar arasında yalnız Van-der-Vaals qarşılıqlı təsir qüvvələri olan) mayelər üçün məşhur

$$\eta = \frac{kT\tau_0}{\pi r \delta^2} e^{\frac{\Delta E}{RT}} = A e^{\frac{\Delta E}{RT}} \quad (5)$$

düsturunu almışdır. Burada δ – qonşu molekullar arasındaki məsafədir.

Samoylovun hidratisiya nəzəriyyəsində hesab edilir ki, ionun elektrik sahəsi təsiri ilə yuxarıda qeyd olunduğu kimi, ion ətrafi su molekullarının translyasion hərəkətinin

zəifləməsi və ya güclənməsi nəticəsində onların iordan uzaq məsafələrdə yerləşən (sərbəst) su molekulları ilə mübadilədə olması üçün lazım olan aktivləşmə enerjisi də dəyişir. Təmiz su üçün aktivləşmə enerjisini E_0 ilə, molekulun tarazlıq halında yaşama müddətini τ ilə, ion suya daxil edildikdə bu parametrləri E_i və τ_i ilə işarə etsək, təmiz və ion ətrafi su molekullarının tarazlıq halında yaşama müddətləri üçün aşağıdakı ifadələr yazılı bilər:

$$\tau = \tau_0 e^{\frac{E_0}{RT}} \quad (6)$$

$$\tau_i = \tau_0 e^{\frac{E_i}{RT}} \quad (7)$$

Bələliklə, ionun təsiri ilə molekulun tarazlıq halında yaşama müddətləri və aktivləşmə enerjilərinin qiymətləri dəyişir (5) və (6)-dan

$$\frac{\tau_i}{\tau} = e^{\frac{E_i - E_0}{RT}} = e^{\frac{\Delta E_i}{RT}} \quad (8)$$

alarıq. Burada iki hal ola bilər.

$$\text{a)} E > E_0 ; \tau_i > \tau ; \quad \text{b)} E < E_0 ; \tau_i < \tau \quad (9)$$

(9 b) şərti göstərir ki, ionu suya daxil etdikdə su molekullarının ionla qarşılıqlı təsiri nəticəsində ionətrafi su molekulunun bir tarazlıq vəziyyətindən digərinə kecid çətinləşir $\tau_i > \tau$ olur, yəni ionətrafi su molekulu tarazlıq vəziyyətində daha çox müddətdə qalır, aktivləşmək üçün, kecid üçün aktivləşmə enerjisini daha gec əldə edir. Bu zaman ionətrafi molekulun sərbəst su molekulları ilə mübadilə tezliyi, kecid tezliyi (su molekulunun özünün rəqs tezliyi ilə qarışdırılmayaq) təmiz su molekullarının bir-birləri ilə mübadilə tezliyindən kiçik olur:

$$(\nu_{su})_{ion} \rightleftharpoons (\nu_{su})_0 < (\nu_{su})_0 \rightleftharpoons (\nu_{su})_0 \quad (10)$$

Bu növ hidratasiya hidrofob və ya müsbət hidratasiya adlandırılmışdır. Hidrofob hidratasiya zamanı ion suyu strukturlaşdırır, çünki ionətrafi su strukturlaşmış olur, uzaq molekullar (sərbəst su) isə hidrogen rabitələri vasitəsilə əvvəlcədən müəyyən struktura malik olur, ionun elektrik sahəsinin təsiri kiçik olur və su bütövlükdə strukturlaşmış olur. Belə hidratasiyaya əsasən polyarlaşdırma qabiliyyəti və yükünün səthi sıxlığı böyük olan ionlar uğrayırlar. Və əksinə, (b) halında isə

$$(\nu_{su})_{ion} \rightleftharpoons (\nu_{su})_0 > (\nu_{su})_{ion} \rightleftharpoons (\nu_{su})_0 \quad (11)$$

olur. (9b) şərti ödəndikdə isə, ionətrafi su molekulları ilə sərbəst su molekulları arasındakı mübadilə zamanı hidrogen rabitələri qırılır, ionətrafi su molekulları da ionun poliarizəetmə qabiliyyətinin kiçik və yükünün səthi sıxlığı kiçik olan böyük ölçülü molekullar tərəfindən dağıdılmış olduqlarından bütövlükdə suyun strukturu təmiz suya nəzərən az strukturlu olur və hidrofil və ya mənfi hidratasiya hadisəsi baş verir.

Tədqiqat metodu

İşdə |4| dissosiasiya olunmuş ionların hidratlaşma ədədlərinin cəminin (h_1+h_2) təyin olunması, eləcə də sadə yolla təyin olunmasının faydalı olduğunu nəzərə alaraq,

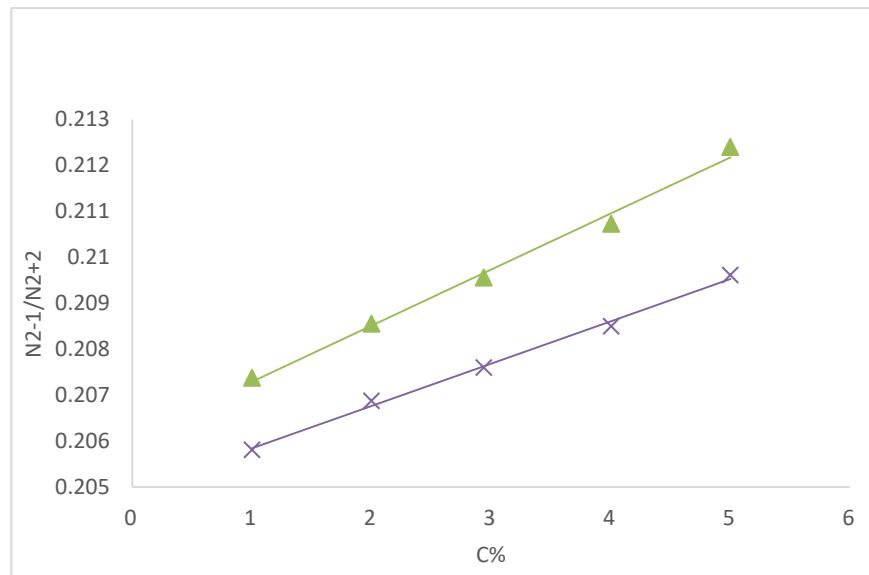
elektrolitlərin duru məhlullarda refraktometrik metodla h_1+h_2 kəmiyyəti üçün analitik ifadə alınmışdır. Optik tezliklərdə dipolların və ionların elektrik sahəsinin dəyişməsinə həssas olmadıqlarını, reaksiya vermədiklərini və mühitin polyarizələşməsində əsas payı elektronlar verdiyini nəzərə alaraq, elektrolitlərin suda duru məhlulları üçün Lorents-Lorents tənliyindən istifadə etməklə və bir sıra riyazi əməliyyatlar aparmaqla $h_{K^+} + h_{A^-}$ üçün aşağıdakı ifadə alınmışdır.

$$h_{K^+} + h_{A^-} = \frac{3M_{KA}}{\rho N_A \cdot \alpha_{H_2O}} \operatorname{tg}\varphi - i \left(\frac{r_{K^+}}{r_{H_2O}} \right)^3 - j \left(\frac{r_{A^-}}{r_{H_2O}} \right)^3 \quad (12)$$

Burada M_{KA} - düzən molekulyar kütləsi, ρ - məhlulun sıxlığı, r_{H_2O} , r_{K^+} , r_{A^-} ionların və su molekulunun radiusu, α - suyun polyarizasiya əmsalıdır.

1. Alınan nəticələr və müzakirəsi

(12)-yə daxil olan $\operatorname{tg}\varphi$ -nin qiyməti $\frac{n^2-1}{n^2+2} - c$ asılılığından təyin olunmuşdur (şəkil 1).



Şəkil 1. Sindirma əmsalının n^2-1/n^2+2 münasibətinin konsentrasiyadan c asılılığı

Bir sıra qeyri-üzvi duzlar üçün alınan nəticələr I a cədvəlində sistemlərə polimer daxil etməklə alınan nəticələr isə I b cədvəlində verilmişdir.

Cədvəl I. Bir sıra elektrolitlər üçün h_1+h_2 parametrlərinin qiymətləri

Məhlul	r_1+r_2 (nm)	h_1+h_2
HCl	233	13.3
LiCl	276	14
NaCl	295	16.3
CsCl	348	20
KCl	319	16.1
KBr	334	24,2
KJ	338	37.3
Na ₂ SO ₄	34.1	448
MgSO ₄	33.7	330
CuSO ₄	45.1	335
BaCl ₂	54.8	535
FeCl ₃	76.9	664

b) Elektrolit məhlullarının əlavə olunmuş PEQ və PVP-nin h_1+h_2 parametrlərinə təsiri

Mehlul	h_1+h_2
KCl+su	16,1
KCl+PEQ (0,04ml)	13,54
KCl+PEQ (1,1ml)	5,86
KBr+H ₂ O	24,2
KBr+PEQ6000 (0,3ml)	16,7
KBr+PEQ6000 (0,5ml)	12,6
KBr+PVP12000 (1ml)	13,5
KBr+PVP12000 (2ml)	12,2
K ₂ SO ₄	18,6
K ₂ SO ₄ +PVP12000 (1ml)	11,9
K ₂ SO ₄ +PVP12000 (2ml)	8,6

Cədvəldən görünür ki, müxtəlif ion cütləri üçün hidratasiya ədədi (h_1+h_2) kationların və anionların radiuslarından, yüklerinin səthi sıxlıqlarından asılı olaraq müxtəlif qiymətlər alır. Bu nəticə müxtəlif cüt ionların hidrofob və hidrofil hidratasiya proseslərində iştiraklarının, suyun strukturu dəyişdirmək dərəcələrinin yekun nəticəsidir. Eyni zamanda elektrolitlərin suda məhlullarına polimerlər əlavə etdikdə (I b)-dən göründüyü kimi h_1+h_2 parametri azalır. Bu yəqin ki, polimerlərin müxtəlif hidrofob və hidrofil qruplarının su molekulları ilə qarşılıqlı təsirlərin nəticəsidir. İonla polimerlərin su molekulları ilə qarşılıqlı təsirlərinin rəqabəti ilə əlaqədardır.

ƏDƏBİYYAT SİYAHISI

1. Бернал Дж., Фаулер Р. Структура воды и ионных растворов. Усп. физ. наук, 1934, т.14, с.586-644
2. Самойлов О.Я. Структура водных растворов электролитов и гидратация ионов. М., АН СССР, т.1957, с.76-182.
3. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. Изд. «Наука», 1975.
4. Масимов Э. А., Аббасов Х. Ф., Рефрактометрическое определение числа гидратации ионов в разбавленных водных растворах сульфата магния, Журнал Физической Химии, т. 86, № 3, 2012, с. 470–472.

UOT 532**PACS:77.22.Ej, 64.75.Bc, 31.70.Dk, 61.70.Og**

PEQ-LİMON TURŞUSUNUN NA DUZU-SU İKİFAZALI SİSTEMİNİN FAZALARININ FİZİKİ-KİMYƏVİ XASSƏLƏRİNİN TƏDQİQİ

ŞAHBAZOVA G.M., ƏLİYEV E.Z., MIRZƏZADƏ A.V.

Bakı Dövlət Universiteti, Azərbaycan

*shahbazova.gunel@mail.ru***XÜLASƏ**

Təqdim olunan işdə PEQ-limon turşusunun Na duzu-su ikifazalı sisteminin fazalarının fiziki-kimyəvi xassələri tədqiq olunmuşdur. Bunun üçün ilk önce limon turşusunun natrium duzu məhlulunun struktur xüsusiyyətləri araşdırılmış (özlü axının aktivləşmə parametrləri, struktur temperaturu) və ona PEQ-in təsirinə baxılmışdır. Daha sonra baxduğumuz məhlullar ikifazalı sistem verdikdən sonra onu fazalarına ayırib, aşağı və yuxarı fazadakı məhlulların kinematik və dinamik özlülükleri, sıxlıqları ölçülmüşdür. Özchlüyün temperaturu asılılığından istifadə edərək özlü axının aktivləşmə parametrləri (ΔG_η , ΔH_η , ΔS_η), struktur temperaturu (T_{str}) təyin olunmuşdur.

Açar sözlər: ikifazalı sistemlər, polietilenqlikol, limon turşusunun natrium duzu, özlülük, aktivləşmə parametrləri

**STUDY OF THE PHYSICAL-CHEMICAL PROPERTIES OF THE PHASES OF THE PEG-CITRIC
ACID NA SALT-WATER TWO-PHASE SYSTEM**
ABSTRACT

In the presented work, the physicochemical properties of the phases of the two-phase system PEG-sodium citrate-water were studied. For this, first of all, the structural properties of sodium salt solution of citric acid were investigated (viscous flow activation parameters, structural temperature) and the effect of PEG on it was examined. Then, after the two-phase system was formed by the solutions we considered, it was separated into its phases, and the kinematic and dynamic viscosities and densities of the solutions in the lower and upper phases were measured. The activation parameters of the viscous flow (ΔG_η , ΔH_η , ΔS_η) and structure temperature (T_{str}) were determined from the temperature dependence of viscosity.

Key words: two-phase systems, polyethylene glycol, sodium salt of citric acid, viscosity, activation parameters

**ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФАЗ ДВУХФАЗНОЙ СИСТЕМЫ
ПЭГ-ЛИМННАЯ КИСЛОТА НА-СОЛЕННАЯ ВОДА**
РЕЗЮМЕ

В представленной работе исследованы физико-химические свойства фаз двухфазной системы ПЭГ-цидрат натрия-вода. Для этого прежде всего были исследованы структурные свойства раствора натриевой соли лимонной кислоты (параметры активации вязкого течения, структурная температура) и рассмотрено влияние на него. Затем, после образования двухфазной системы из рассмотренных нами растворов, ее разделяли на фазы и измеряли кинематическую и динамическую вязкости и плотности растворов в нижней и верхней фазах. По температурной зависимости вязкости определяли активационные параметры вязкого течения (ΔG_η , ΔH_η , ΔS_η) и температуру конструкции (T_{str}).

Ключевые слова: двухфазные системы, полиэтиленгликоль, натриевая соль лимонной кислоты, вязкость, параметры активации.

Biooji hissəciklər qarışıqlarının komponentlərinin hər birinin ayrılıqda tədqiq etmək məqsədi ilə ayrılması və təmizlənməsi qarşısında tibbi və farmokoloji sənayelərin qoyduğu tələblər gün gündən artmaqdadır. Kimyəvi maddələrin ayrılması və təmizlənməsi üçün mövcud olan çoxlu sayıda metodlar biooji maddələrin təmizlənməsi üçün yaramır, biooji materiallar müxtəlif faktorların təsiri nəticəsində asanlıqla öz biooji aktivliklərini itirirlər, denaturasiyaya uğrayırlar. Ona görə də son zamanlar biooji maddələrin təmizlənməsi üçün "yumşaq" mühit təmin olunmaqla bir sıra xüsusi metodlar işlənib hazırlanmışdır, lakin bu metodlar böyük əmək tələb edir və baha başa gəlir.

Albertson [1] biooji materialların ayrılması və təmizlənməsi üçün sadə, ucuz və səmərəli metod-maddələrin ikifazalı su-polimer sistemlərində qeyri-bərabər paylanmasına əsaslanan metodу işləyib hazırlanmışdır. Məlumdur ki, kimyəvi xassələri bir-birindən fərqlənən iki polimerin və ya bir polimer və bəzi elektrolitlərin sulu məhlullarının qarışığının, komponentlərin konsentrasiyasının müyyən bir qiymətindən böyük qiymətlərində iki fazaya ayrılır. Belə ikifazalı sistemin fazalarının biri polimerin biri, digəri isə ikinci polimerlə zəngin olur. Fazalarda həllədici sudur və hər iki fazanın əsasını təşkil edir (~70÷95%). Belə sistemə biooji obyektlər (zülallar, hüceyrələr, viruslar və c.) qarışığı daxil edildikdə, onların hər bir növü sistemin bu və ya digər fazasında toplanırlar. Biomaterialların ikifazalı sistemdə paylanması onların fərdi xüsusiyyətlərindən, fazaəmələgətirən komponentlərinin təbiətindən və konsentrasiyasından, sistemə edilən əlavələrin konsentrasiyasından və təbiətindən asılıdır.

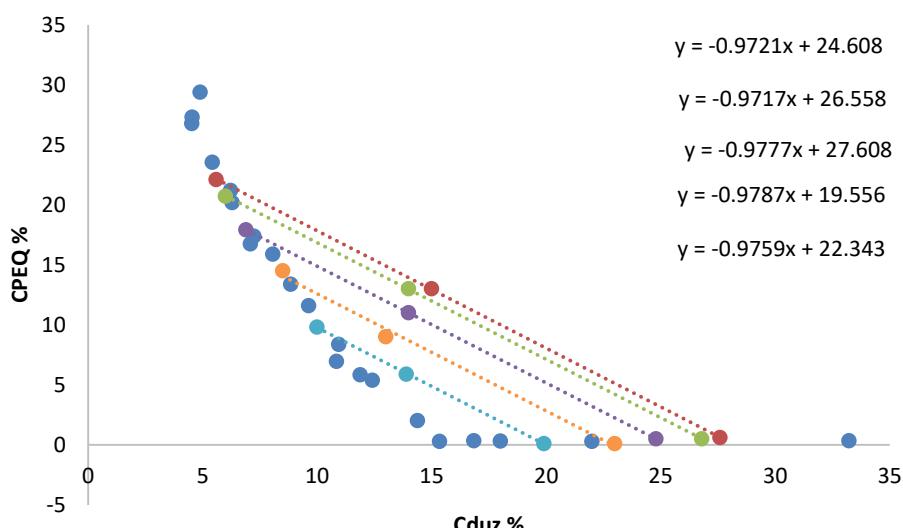
Müasir təsəvvürlərə görə sistemin fazalarda strukturuna və termodinamik halına görə fərqlənən iki su-polimer strukturu formalasdır [1]. Bu iki fazalar bir birlərindən fiziki-kimyəvi xassələrinə görə və müxtəlif paylanan hissəciklərə hərisliklərinə görə fərqlənirlər. hesan edirik ki, homogen-heterogen faza keçidinin baş vermə ardıcılığını izləsək, onların ayrılıqda bir sıra fiziki-kimyəvi xassələrini tədqiq etmək aktualdır.

Özlü axının aktivləşmə parametrləri dedikdə, baxılan sistemin özlü axının aktivləşmə parametrlərinin - Gibbs sərbəst enerjisinin (ΔG_η), entalpiyanın (ΔH_η) və entropiyanın dəyişməsi (ΔS_η) başa düşülür [2, s.32- 35] Özlü axının aktivləşmə parametrlərinin (ΔG_η , ΔH_η , ΔS_η) müxtəlif xarici amillərdən (temperatur, konsentrasiya və s.) asılılıqlarının təhlili, mayelərdə, o cümlədən məhlullarda yaranan struktur dəyişmələrinin tədqiqində mühüm rol oynayır [2, s.32-35]. Mayelərin özlü axının aktivləşmə parametrləri, müxtəlif xarici amillərin təsirilə mayelərdə yaranan enerji və struktur dəyişikliklərini müəyyən etməyə, sulu məhlullarda hidrogen rabitələrinin əmələ gəlməsi və qırılması haqqında müəyyən informasiya əldə etməyə imkan verir [3, s.23], [4, s.7185], [5, s.1457]. Özlü axının aktivləşmə Gibbs enerjisi (ΔG_η) verilmiş təzyiq və temperaturda 1 mol maye molekullarının axın halına keçməsinə sərf olunan enerjidir. Özlü axının aktivləşmə entalpiyası (ΔH_η) məhlulda yaranan dəyişmələri enerji baxımından xarakterizə edir. Belə ki, ΔH_η -in qiymətinin böyük olması baxılan sistemin daha möhkəm struktura malik olmasını göstərir. Özlü axının aktivləşmə entropiyası (ΔS_η) isə mayedə mövcud nizamlılıq haqqında qiymətli məlumatlar verir.

İşdə İspaniyanın "Panreac" firmasının istehsal etdiyi molekulyar çəkisi $M_n=6000$ olan PEQ və limon turşusunun natrium duzundan istifadə edilir. Bütün təcrübələr kvars plitələrində ikiqat distillə edilmiş su ilə aparılmışdır. PEQ-in ilkin məhlulunu (adətən 39%) hazırlamaq üçün müəyyən miqdarda polimer tərəzidə çəkilmiş və su hamamında 100°C -də qızdırılmaqla 10-15 dəqiqə suda həll edilmişdir. Sterilizasiya etmək üçün polimer məhlulu

isti halda süzülür və 20 q qablarda soyuducuda saxlanılır. Limon turşusunun sodium duzunun sulu məhlulları (adətən 37%) hazırlanmış və sonra faizlə ifadə edilmişdir. Məhlulun özlülüyünü ölçmək üçün SVM3000 Stabinger viskozimetrindən istifadə etdik.

Ikifazalı sulu polimer sistemlərinin əsas xarakteristikalarından biri onun binodal əyrisidir (hal diaqramı). Ikifazalı sulu polimer sistemlərinin binodallı dedikdə, C_{pol1} və C_{pol2} asılılığında bırfazalı oblastdan ikifazalı oblasta keçən nöqtələrin həndəsi yeri başa düşülür. Şəkil 1-də sxematik olaraq baxdığımız PEQ-limon turşusunun Na duzu-su ikifazalı sisteminin tipik hal diaqramı verilmişdir.



Şəkil.1-PEQ-limon turşusunun sodium duzu-su ikifazalı sisteminin hal diaqramı və binodal əyrisi

Şəkil 1-də binodal əyrisindən aşağıdakı oblast bırfazalı-homogen oblast, yuxarıdakı oblast isə ikifazalı-heterogen oblastdır. Başqa sözlə, yuxarı oblastdan götürülmüş istənilən nöqtənin koordinatlarına uyğun sistem termodynamik tarazlıq halına gəldikdə iki fazaya ayrılmış olacaq. Müasir təsəvvürlərə görə sistemin fazalarda strukturuna və termodynamik halına görə fərqlənən iki su-polimer strukturu formalaşır [1]. Bu iki fazalar bir birlərindən fiziki-kimyəvi xassələrinə görə və müxtəlif paylanması hissəciklərə hərisliklərinə görə fərqlənirlər. Hesən edirik ki, homogen-heterogen faza keçidinin baş vermə ardıcılığını izləsək, onların ayrılıqda bir sıra fiziki-kimyəvi xassələrini tədqiq etmək aktualdır.

Təqdim olunan işdə PEQ-limon turşusunun Na duzu-su ikifazalı sisteminin fazalarının ayrılıqda fiziki-kimyəvi xassələri tədqiq olunmuşdur. Bunun üçün həm heterogen oblastda, həm də homogen oblastdan götürdüyüümüz nöqtəyə uyğun məhlul hazırlayıb, baxdığımız ikifazalı sistemi fazalarına ayırib, aşağı və yuxarı fazadakı məhlulların özlülükleri, sıxlıqları, sindirma əmsali, elektrikkeçiriciliyi ölçülmüşdür. Özlülünün temperatur asılılığından istifadə edərək özlü axının aktivləşmə parametrləri (ΔG_η , ΔH_η , ΔS_η), struktur temperaturu (T_{str}) təyin olunmuşdur.

Baxılan sistemlərin normal atmosfer təzyiqində müxtəlif temperaturlarda sıxlığının, dinamik, kinematik özlülüğünün təcrubi qiymətləri cədvəl 1-2-də, özlü axının aktivləşmə parametrlərinin (ΔG_η^\pm , ΔH_η^\pm və ΔS_η^\pm) hesablanmış qiymətləri cədvəl 3,4-də göstərilmişdir.

Cədvəl 1. PEQ-limon turşusunun Na duzu-su ikifazalı sistemini fazalara ayırdıqdan sonra aşağı fazadakı məhlulların dinamik, kinematik özlülükleri, sıxlıqları

N	t, °C	η , mPa*san	v, mm ² /s	ρ , q/sm ³
1	25	4.3453	3.5603	1.2205
2	30	3.7592	3.0819	1.2198
3	35	3.2992	2.7176	1.2140
4	40	2.8371	2.3410	1.2119
5	45	2.5623	2.1271	1.2046
6	50	2.2908	1.8997	1.2059
7	55	2.0843	1.7331	1.2026

Cədvəl 2. PEQ-limon turşusunun Na duzu-su ikifazalı sistemini fazalara ayırdıqdan sonra yuxarı fazadakı məhlulların dinamik, kinematik özlülükleri, sıxlıqları

N	t, °C	η , mPa*san	v, mm ² /s	ρ , q/sm ³
1	25	149.72	137.22	1.0911
2	30	124.68	114.60	1.0880
3	35	102.37	94.561	1.0826
4	40	78.743	72.856	1.0808
5	45	73.925	68.670	1.0765
6	50	63.345	59.040	1.0729
7	55	53.642	50.200	1.0686

Cədvəl 3. PEQ-limon turşusunun Na duzu-su ikifazalı sistemini fazalara ayırdıqdan sonra yuxarı fazadakı məhlulların müxtəlif temperaturlarda özlü axının aktivləşmə parametrləri (ΔG_{η}^{\pm} , ΔH_{η}^{\pm} və ΔS_{η}^{\pm})

T	ΔG	ΔH	ΔS
298.15	1244197	72471.5	242.0706
303.15	1247741	72086.64	236.792
308.15	1245197	68809.54	222.2989
313.15	1223972	62915.66	199.9122
318.15	1243812	54654.66	170.789
323.15	1237213	44253.06	135.9428
328.15	1242414	31916.58	96.26217

Cədvəl 4. PEQ-limon turşusunun Na duzu-su ikifazalı sistemini fazalara ayırdıqdan sonra aşağı fazadakı məhlulların müxtəlif temperaturlarda özlü axının aktivləşmə parametrləri (ΔG_{η}^{\pm} , ΔH_{η}^{\pm} və ΔS_{η}^{\pm})

T	ΔG	ΔH	ΔS
298.15	367198.7	-9481.05	-32.7996
303.15	365639.9	-9482.02	-32.2783
308.15	365609.8	-9482.96	-31.7738
313.15	359130	-9483.86	-31.2854
318.15	354918.7	-9484.74	-30.8122
323.15	345750.2	-9485.59	-30.3535
328.15	356736.1	-9486.42	-29.9088

Cədvəllərdən göründüyü kimi, temperatur artdıqca özlü axının aktivləşmə entalpiyası və entropiyası azalır. Baxdığımız ikifazalı sistemdə yuxarı faza PEQ-lə zəngin olduğundan, həmin fazada özlü axının entalpiyası da böyük olmalıdır. Bu nəticə də təcrübədə təsdiq olunur.

Cədvəl 5-də Su-limon turşusunun Na duzu və PEQ-su-limon turşusunun Na duzu sistemlərinin ikifazalı sistem vermədən, ikifazalı verdikdən sonar sistemin yuxarı və aşağı fazalarındakı məhlulların struktur temperaturu verilmişdir.

Cədvəl 5. Su-limon turşusunun Na duzu və PEQ-su-limon turşusunun Na duzu (ikifazalı vermədən, ikifazalı sistemin yuxarı və aşağı fazaları) sisteminin struktur temperaturu

Məhlullar	T _{str}
Su-limon turşusunun Na duzu-PEQ (yuxarı-PEQ çox olan faza)	177
Su-limon turşusunun Na duzu-PEQ (aşağı-limon turşusunun sodium duzu çox olan) fazadakı məhlul	211
Su-limon turşusunun Na duzu	148
Su-limon turşusunun Na duzu-PEQ (ikifazalı vermır)	160

Struktur temperaturu bilavasitə mayedə olan strukturlaşdırıcı qarşılıqlı təsirlərlə əlaqədar parametrdir. Bu səbəbdən də hər hansı faktorların təsiri ilə mayenin (məhlulun) strukturunun dəyişməsi struktur temperaturunun qiymətini dəyişdirəcək. Belə ki, sulu məhlulun struktur temperaturu təmiz suyun struktur temperaturundan böyükdürə, suya əlavə edilən maddə suyu strukturlaşdırır. Əgər sulu məhlulun struktur temperaturu təmiz suyun struktur temperaturundan kiçikdirə, suya əlavə edilən maddə suyun strukturunu dağıdır.

Təmiz suyun struktur temperaturu T_{str}=146K olduğundan, deyə bilərik ki, limon turşusunun Na duzu suya neytral təsir edir, lakin PEQ-in təsirilə bu sistem suyu strukturlaşdırır. PEQ-in suyu strukturlaşdırıldığı məlumdur. Ona görə ikifazalı sistemin yuxarı fazasında PEQ çox olduğundan struktur temperaturu da həmin fazada daha çoxdur.

ƏDƏBİYYAT SİYAHISI

- Zaslavsky B.Y, Masimov E.A, Methods of Analysis of the relative hydrophobicity of biological solutes// Topics current chemistry. 1988-146.-p.171-202
- Məsimov E.Ə., Həsənov H.Ş., Paşayev B.G., Həsənov N.H. Özlü axının aktivləşmə parametrlərinin təyini üsulları. Bakı Universitetinin Xəbərləri, fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, 2005, № 2, s.138-150
- Альбертсон П.О. Разделения клеточных частиц и макромолекул – М: Мир, 1974, 392 с.
- Масимов, Э.А., Гасанов, Г.Ш., Паشاев, Б.Г. Изменение структуры воды в водных растворах уксусной кислоты в зависимости от концентрации и температуры по данным денситометрии, вискозиметрии и ИКспектроскопии // Журнал физической химии, – 2013. 87, № 6, – с. 969-972.
- Abbasi, A., Ziad Saghir, M., Kawaji, M. Evaluation of the activation energy of viscous flow for a binary mixture in order to estimate the thermodiffusion coefficient // Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics, – 2011. 36, № 1, – p. 23-40.
- Piskulich, Z.A., Mesele, O.O., Thompson, W.H. Activation Energies and Beyond // Journal of Physical Chemistry A, – 2019. 123, – p. 7185-7194.
- Rohindra, D.R., Lata, R.A., Coll, R.K. A simple experiment to determine the activation energy of the viscous flow of polymer solutions using a glass capillary viscometer // European Journal of Physics, – 2012. 33, № 5, – p. 1457-1464.

IOT: 532PACS: 77.22.Ej, 64.75.Bc, 31.70.Dk, 61.70.Og

STUDY OF SOL-GEL PHASE TRANSITION IN THE AGAROSE-WATER SYSTEM BY ELECTRICAL CONDUCTIVITY

E.A.MASIMOV, A.R.IMAMALIYEV, A.H.ASADOVA

aynurasadova19@gmail.com

ABSTRACT

In the present work the electrical conductivity method was used to study the sol-gel phase transition in the agarose-water system. The 0.1% agarose-water system is used for this purpose; The temperature dependence of the conductivity of 0.1%, 0.3% and 1% solutions and as well as the influence of hydrophobic (isoamyl alcohol) and hydrophilic (Na salt of tartaric acid) additives on this dependence were studied. It was shown that the hydrophilic additive makes the gel more stronger and shifts the gelation (T_g) and melting (T_e) temperatures up. The hydrophobic additive (hydrophobic isoamyl alcohol) on the contrary weakens the gel and shifts the gelation (T_g) and melting (T_e) temperatures downward.

Keywords: polymeric hydrogels, agarose, electrical conductivity, hydrophobic additive, hydrophilic additive.

AQAROZA-SU SİSTEMİNDƏ ZOL-GEL FAZA KEÇİDİNİN ELEKTRİK KEÇİRİCİLİYİ METODU VASİTƏSİ İLƏ TƏDQİQİ

XÜLASƏ

İşdə aqaroza-su sistemində zol-gel faza keçidini tədqiq etmək məqsədi ilə elektrik keçiriciliyi metodundan istifadə edilmişdir. Bu məqsədlə aqaroza-su sisteminin 0.1%; 0.3% və 1%-li məhlullarının keçiriciliyinin temperatur asılılığı, eləcə də həmin konsentrasiyalara hidrofob (izoamil spirti) və hidrofil (çaxır turşusunun Na duzu) təbiətli əlavələrin bu asılılığa təsiri öyrənilmişdir. Göstərilmişdir ki, hidrofil təbiətli əlavə gel möhkəmləndirir və gelin geləmələgəlmə (T_g) və ərimə (T_e) temperaturlarını yuxarıya doğru sürüşdürür. Hidrofob təbiətli əlavə (hidrofob izoamil spirti) isə əksinə gel zəiflədir, yəni geləmələgəlmə (T_g) və ərimə (T_e) temperaturlarını aşağıya doğru sürüşdürür.

Açar sözlər: polimer hidrogelləri, aqaroza, elektrik keçiriciliyi, hidrofob əlavə, hidrofil əlavə

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ЗОЛЬ-ГЕЛЬ В СИСТЕМЕ АГАРОЗА-ВОДА МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ

АННОТАЦИЯ

В данном исследовании метод электропроводности применялся для изучения фазового перехода золь-гель в системе агароза-вода. Изучена температурная зависимость проводимости 0,1%, 0,3% и 1% растворов, а также влияние гидрофобной (изоамиловый спирт) и гидрофильтной (На соль винной кислоты) добавок на эту зависимость и показано, что гидрофильтная добавка упрочняет гель и сдвигают вверх температуры гелеобразования (T_g) и плавления (T_e). Гидрофобная добавка (гидрофобный изоамиловый спирт) наоборот ослабляет гель и снижает температуры гелеобразования (T_g) и плавления (T_e).

Ключевые слова: полимерные гидрогели, агароза, электропроводность, гидрофобное добавка, гидрофильтное добавка.

INTRODUCTION

Polymers (and their alloys) can be divided into two types according to their electrical conductivity: neutral and charged polymers [1,2]. Examples of neutral polymers among the

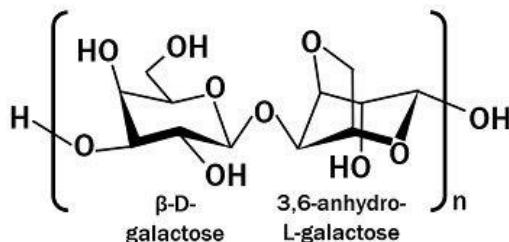
natural polymers are gelatin and agarose. Gellan, carrageenan, etc. biopolymers related to the charged biopolymers [3]. The solution of these biopolymers in water becomes a gel above a certain concentration (x_g) and below a certain temperature (T_g), that is, it retains its shape (loses fluidity) under small mechanical influences. This feature of the gel is associated with the presence of a three-dimensional spatial network, in the core of which water is immobilized, and opens the way to numerous applications [4].

The study of electrical conductivity in polymer gels carries some information about their structure [5]. In addition, since electrical conductivity around phase transitions undergoes a significant change, the measurement of electrical conductivity makes it possible to determine the points of phase transitions with some accuracy. Conductivity studies in such systems play an important role when choosing a model to study electrical properties of the brain or the effect of electric fields on the central nervous system [6].

It was mentioned above that agarose, a typical representative of natural polysaccharides, is an uncharged (neutral) polymer and possesses many useful properties: bioabrasiveness, biocompatibility, strong thermally reversible gel-forming ability, etc. Due to these properties, agarose is now successfully used for drug delivery to the target organ [7,8] and in tissue engineering [9]. When applied, it is necessary to adapt the physical (mechanical, thermal, electrical, etc.) of the agarose gel to the required values, which is achieved by changing the agarose concentration and adding additives of different nature to the gel. In fact, this is done by modifying the gel structure. It was mentioned above that the study of electrical conductivity plays a role in the study of gel structure. The present work studied the dependence of agarose gel conductivity on agarose concentration, temperature, and the influence of hydrophilic and hydrophobic additives on these dependencies.

EXPERIMENT

Agarose is the main component of red algae agar, and its monomer (agarobiose) has the following chemical structure [9]:



The agarose gel was prepared as follows [10]. Agarose powder was weighed on ADAM PW 124 (USA) (accuracy 0.1 mg) and added to bidistilled water. After 1 day of storage (swelling process), the mixture is heated to 95°C. The samples are poured into a glass bath containing platinum electrodes in the form of a solution (sol) and cooled to room temperature. The area of the platinum electrodes is 1 cm² and the distance between them is 0.2 cm. Isoamyl alcohol ((CH₃)₂CH(CH₂)₂OH) was used as a hydrophobic additive in an amount of 1% by weight, and Na-salt of tartaric acid (C₄H₄O₆Na₂*2H₂O) was used as a hydrophilic additive.

The electrical properties of the agarose gel were measured on an IET 1920 LCR meter (USA) at a frequency of 2 kHz. The measuring voltage (test signal) applied to the sample was 0.5 V. In an AC circuit, when the liquid dielectric is poured into a bath with platinum electrodes, it can be considered as a capacitor of capacity C

and a resistor of resistance R connected in parallel. In this case the electrical conductivity is calculated by the following formula:

$$\sigma = \frac{d}{RS}$$

Here S is the area of the electrodes, and d is the distance between the electrodes. Temperature was measured using a chromel-alumel thermocouple. The temperature generated at the thermocouple outlet was measured with an EHQ B7-21 microvoltmeter (Russia). When the solution is in gel form, measurements are taken after holding for at least one hour at each temperature because agarose gel takes a long time to reach thermodynamic equilibrium. Therefore, a GL-100 thermostat (China) was used to ensure temperature stability during measurements.

RESULTS AND THEIR EXPLANATION

The results of measurements are presented in graphs 1-4. Figure 1 shows the temperature dependences of the electrical conductivity of the agarose gel at different concentrations in both the heating and cooling modes. Since the 0.1% agarose solution did not form a gel, the dependence showed no hysteresis. The critical concentration of agarose for gel formation is about 0.15% [11]. Although the agarose hydrogel is a thermally reversible gel, there is a strong thermal hysteresis in its physical properties. That is, when heated and cooled, the values of the physical quantities characterizing the gel (radiation coefficient, flux voltage, electric voltage, etc.) do not overlap at the same temperature. Confirmation of this can be seen in 0.3% and 1% solutions (curves 2 and 3 in Fig. 1). These curves can be characterized as follows. When the gel is heated from room temperature, its electrical conductivity increases. At a certain temperature (60-80°C) this increase occurs with a small jump. Obviously, this is due to the disintegration of the spatial mesh of the gel. This temperature is called the gel melting temperature or the temperature of the gel-sol phase transition (T_m). When the resulting solution (sol) cools from 90 to 95 °C, the conductivity decreases, but the curve goes over the top because the bulk network is not restored. Recovery of the spatial network occurs at very low temperatures (30-40 °C), which again is accompanied by a weak jump in the decrease of conductivity. This jump is associated with the sol-gel phase transition, and the corresponding temperature is called the transition temperature (T_g). Thus, according to curves 2 and 3, the gel formation temperature is $T_g = 35^\circ\text{C}$ for a 0.3% weak agarose gel and $T_g = 40^\circ\text{C}$ for a 1% strong gel. The melting temperature of the 0.3% gel $T=65^\circ\text{C}$ and the 1% gel $T=75^\circ\text{C}$.

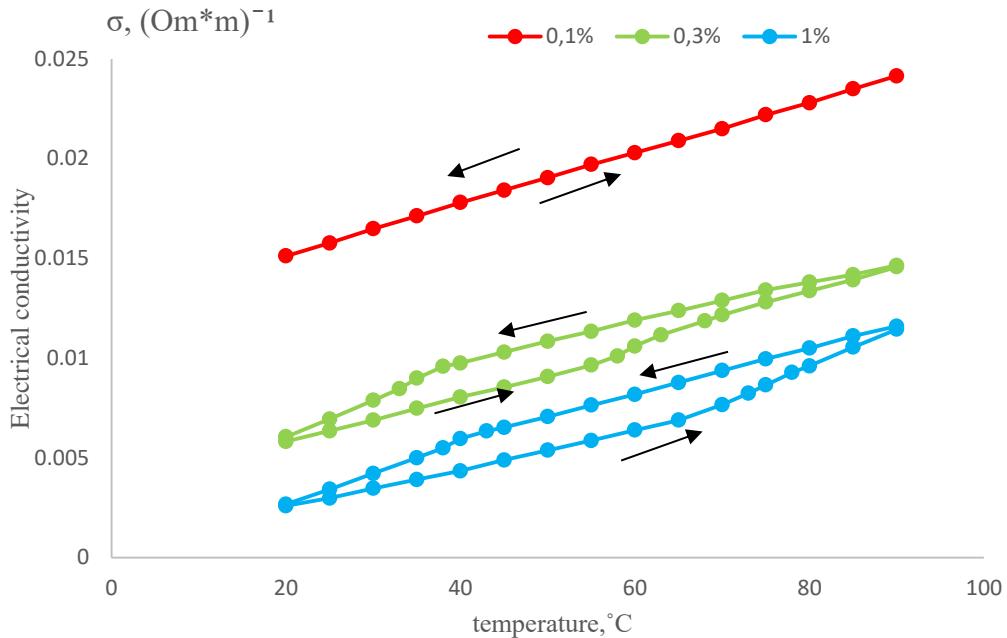


Fig.1 The dependence of electrical conductivity on temperature for different concentrations of agarose-water systems

Figure 2 shows the dependence of the conductivity of agarose solution on the concentration of agarose at 25 °C. As can be seen, the conductivity decreases with increasing concentration. The main reason for this is that the mobility of ions decreases with increasing polymer concentration as a result of increasing solution viscosity. Another reason is the decrease in ion mobility as a result of the compression of the spatial network nuclei as the concentration increases, when the solution is in the form of a gel.

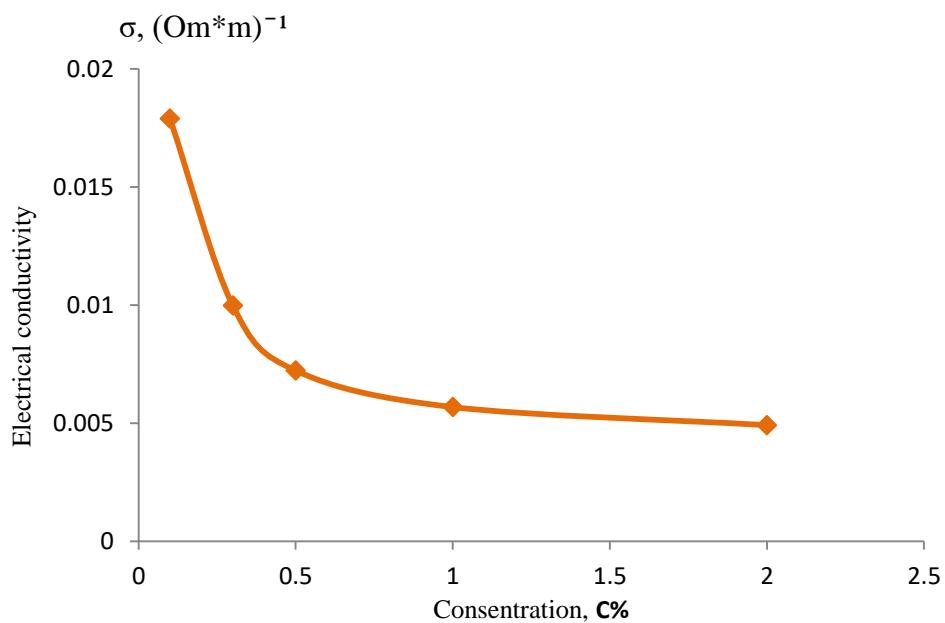


Fig.2 The dependence of agarose gel conductivity on the concentration of agarose-water systems

Fig. 3 shows temperature dependences of electrical conductivity of 1% agarose gel and 1% gel with hydrophobic and hydrophilic additives. In both cases the gel conductivity increases. Hydrophobic additive increases the conductivity by 2-3 times, and hydrophilic additive increases the conductivity by at least one compilation.

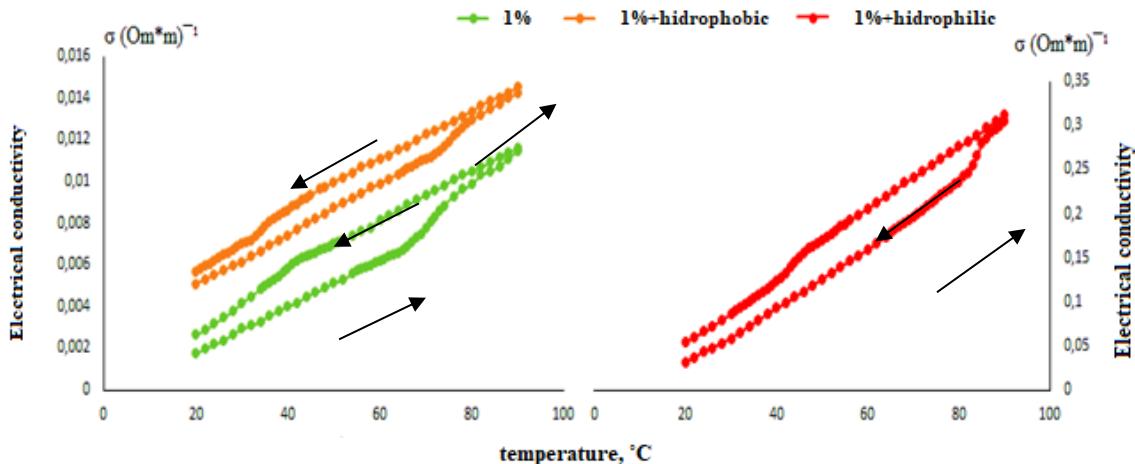


Fig. 3. The effect of hydrophobic (isoamyl alcohol) and hydrophilic (Na salt of tartaric acid) additives on the agarose gel on electrical conductivity.

In addition, hydrophobic and hydrophilic additives shift the gel melting and gelation temperatures in opposite directions. For example, when 1% isoamyl alcohol (hydrophobic) is added to 1% agarose gel, the gelation temperature decreases from 40 °C to 36 °C and melting temperature decreases from 75 °C to 73 °C, so the hydrophobic additive weakens the gel. Adding 1% sodium salt of tartaric acid to 1% agarose gel, the gelation temperature increases from 40 °C to 45 °C, and the melting temperature of the gel from 75 °C to 82 °C, so the hydrophilic additive makes the gel more stronger.

The results for all graphs—the temperature dependence of agarose concentration and the temperature dependence curve of electrical conductivity at each concentration when the hydrophobic and hydrophilic additives are added—are summarized in Table 1. It should be noted that T_g and T_m determined by the conductometric method and this results differ by 1-2 °C with the results of the optical method.

Table 1.

C %	Agarose gel, t_g (°C)	Agarose gel, t_m (°C)	Agarose gel + hydrophilic additive t_g (°C)	Agarose gel + hydrophilic additive t_m (°C)	Agarose gel + hydrophobic additive t_g (°C)	Agarose gel + hydrophobic additive t_m (°C)
0.1	—	—	30	45	—	—
0.3	35	58	40	70	31	61
0.5	36	60	39	66	33	58
1	40	75	45	82	36	73
2	41	88	46	90	38	86

Electrical conductivity in the agarose-water system occurred due to the dissociated H^+ and OH^- ions of water and some ionic additives (charged radicals) due to incomplete purification of agarose biopolymer. It should be noted that the amount of these ions is very less, that is why the given portion of water to the conductivity is more greater.

REFERENCES

1. Mishra A.K., Conducting Polymers: Concepts and Applications, *Journal of Atomic, Molecular, Condensate & Nano Physics*, 2018, v.5, No2, 159-193
2. Kaur G., Adhikari R., Cass P., Bown M., Gunatillake P., Electrically conductive polymers and composites for biomedical applications, *RSC Adv.*, 2015, 5, 37553–37567
3. Gedde U.W., Hedenqvist M.S., Fundamental Polymer Science, Springer, 2018, 501 p
4. Takur V.K., Takur M.K., Voicu S.I., Polymer Gels: Perspectives and Applications, Springer, 2018, 419 p
5. Singh R., Singh P.K., Singh V., Bhattacharya B., **Agarose biopolymer electrolytes: ion conduction mechanism and dielectric studies**, *Cellulose Chem. Technol.*, 2017, v. 51, (9-10), 949-955(2017)
6. Pomfret R., Sillay K., Miranpuri G., Investigation of the electrical properties of agarose gel: characterization of concentration using Nyquist plot phase angle and the implications of a more comprehensive *in vitro* model of the brain, *Annals of Neurosciences*, v. 20, No3, 2013, 99-107
7. Chelu M., Musuc M.A., Polymer Gels: Classification and Recent Developments in Biomedical Applications, *Gels*, 2023, v.9, 161-187
8. Ullah A., Othman M.H., Javed F., Ahmad Z., Akil H., Classification, processing and application of hydrogels: A review, *Materials Science and Engineering*, C 57 (2015) 414–433
9. Taghizadeh A., Taghizadeh M., Zarrintaj P., Ramsey J.D., Habibzadeh S., Seidi F., Saeb M.R., Mozafari M., Salati M.A., Khazai J., Tahmuri A.M., Samadi A., Agarose-Based Biomaterials: Opportunities and Challenges in Cartilage Tissue Engineering, *Polymers* 2020, 12, 1150-1165
10. E. A. Masimov, A. R. Imamaliyev and A. H. Asadova, Spectrophotometric investigation of gel formation in water solution of agar, *Modern Physics Letters B*, 2050147 (7 pages)
11. Tako, M., Nakamura, S. Gelation mechanism of agarose, *Carbohydrate Research*, 1988, 180 (2), 277-284

PACS. 05.70.-a; 78.30.Jw; 05.70.Ce; 07.05.Fb; 07.20.-nИОТ:53

ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ, ИЗОТЕРМИЧЕСКОЕ СЖИМАЕМОСТИ И УПРУГИХ ПАРАМЕТРОВ СОЕДИНЕНИЙ TLGAs_2 И TLGase_2

КУРБАНОВ М. М., ГОДЖАЕВ М. М., МАММЕДОВ Ф. А., САЛИМОВА В.В.

Сумгайитский государственный университет

vefa_24@mail.ru

РЕЗЮМЕ

В данном исследовании на основе экспериментальных значений коэффициентов теплового расширения и изотермического сжатия соединений TLGAs_2 и TLGase_2 расчетные значения модуля Юнга, модуля сдвига и коэффициента Пуассона приведены в табличной форме. Для расчета значений параметров эластичности использовались эмпирические формулы, имеющиеся в литературе.

Отчет был сделан в диапазоне температур $80\div300^0$ К. С повышением температуры в обоих соединениях значения коэффициентов термического расширения и изотермического сжатия увеличиваются, а значения модуля Юнга и модуля сдвига уменьшаются. Значение коэффициента Пуассона увеличивается. Установлено, что такие изменения, происходящие в температурной зависимости значений как тепловых, так и упругих параметров, связаны с изменением химических связей между атомами кристаллической решетки. Таким образом, в обоих соединениях химическая связь между атомами ослабевает с повышением температуры.

Ключевые слова: полупроводники, тепловое расширение, изотермическое сжимаемость, модуль Юнга, температура Дебая, коэффициент Пуассона, модуль сдвига, химическая связь.

**TLGAs₂ VƏ TLGASE₂ BİRLƏŞMƏLƏRİNİN İSTİLİK GENİŞLƏNMƏSİ, İZOTERMİK SİXILMA QABİLİYYƏTİ
VƏ ELASTIQİYYƏT PARAMETRLƏRİ**

XÜLASƏ

Bu işdə TLGAs_2 və TLGase_2 birləşmələrinin istidən genişlənmə və izotermik sixılma əmsallarının eksperimental qiymətləri əsasında Yung modulunun, sürüşmə modulunun və Puasson əmsalının temperaturdan asılılığına dair hesablanmış qiymətləri cədvəl şəklində verilmişdir. Elastiklik parametrlərinin qiymətlərinin hesablanması üçün ədəbiyyatda mövcud olan empirik düsturlardan istifadə edilmişdir.

Hesabat $80\div300^0$ K temperatur intervalında aparılmışdır. Hər iki birləşmədə temperaturun artması ilə istidən genişlənmə və izotermik sixılma əmsallarının qiyməti artır, Yunq modulunun və sürüşmə modulunun qiymətləri azalır. Puasson əmsalının qiyməti isə artır. Həm istilik, həm də elastiklik parametrlərinin qiymətlərinin temperatur asılılıqlarında baş verən bu cür dəyişikliklərin kristal qsfəsində atomlar arası kimyəvi rabitənin dəyişməsi ilə əlaqədar olduğu müəyyən edilmişdir. Belə ki, hər iki birləşmədə temperaturun artması ilə atomlar arası kimyəvi rabitə zəifləyir.

Açar sözlər: yarımkəçiricilər, istidən genişlənmə, izotermik sixılma, Yunq modulu, Debay temperaturu, Puasson əmsali, sürüşmə modulu, kimyəvi rabitə.

**THERMAL EXPANSION, ISOTHERMAL COMPRESSIBILITY AND ELASTIC PARAMETERS
OF TLGAs₂ AND TLGASE₂ COMPOUNDS**

ABSTRACT

In this work, based on the experimental values of the coefficients of thermal expansion and isothermal compression of TLGAs_2 and TLGase_2 compounds, the calculated values of Young's modulus, shear modulus and Poisson's ratio are given in tabular form. To calculate the values of elasticity parameters, empirical formulas available in the literature were used.

The report was made in the temperature range 80–300 K. With increasing temperature in both compounds, the values of the coefficients of thermal expansion and isothermal compression increase, and the values of Young's modulus and shear modulus decrease. The value of Poisson's ratio increases. It has been established that such changes occurring in the temperature dependence of the values of both thermal and elastic parameters are associated with changes in the chemical bonds between the atoms of the crystal lattice. Thus, in both compounds, the chemical bond between the atoms weakens with increasing temperature

Keywords: semiconductors, thermal expansion, isothermal compressibility, Young's modulus, Debye temperature, Poisson's ratio, shear modulus, chemical bond

Введение

Всестороннее изучение физических свойств сложных полупроводниковых соединений важно как с теоретической, так и с практической точки зрения.

Это позволяет, с одной стороны, проверить существующие теоретические модели, эмпирические формулы, включающие тепловые и упругие параметры, и построить новые модели, с другой стороны, определить практическое применение таких соединений.

В данной работе в виде таблиц проведены экспериментальные данные коэффициентов теплового расширения (α), изотермической сжимаемости (X_T) и на основе этих данных вычисленные значения характеристической температуры Дебая (θ), модуль Юнга (E), коэффициент Пуассона (σ) и модуль сдвига (μ) для соединений TlGaS_2 и TlGaSe_2 .

Оба соединения синтезированы по существующей методике, проведен рентгенографический анализ определены тип структуры и параметры элементарных ячеек. Оказалось что оба соединения кристаллизуются в моноклинной сингонии, параметры кристаллической решетки имеют

$a=10,31\text{ \AA}^0$; $b=10,31\text{ \AA}^0$; $c=15,16\text{ \AA}^0$ $\beta=99,7^0$; и для TlGaSe_2 $a=10,76\text{ \AA}^0$; $b=10,77\text{ \AA}^0$; $c=15,62\text{ \AA}^0$ $\beta=100,07^0$.

Тепловые параметры измерялись в интервал температур от 770 K до 300 K на основе существующей методики. Образцы, использованные для измерений, имели цилиндрическую форму, длиной 0,03 м и диаметром 0,005 м. Относительная ошибка эксперимента составила 0,5 %. [1-2]

Экспериментальные значения коэффициентов теплового расширения и изотермического сжатия соединений TlGaS_2 и TlGaSe_2 приведены в табл. 1.

На основе экспериментальных данных тепловое расширение для исследуемых соединений по эмпирической формуле

$$\theta = \frac{19.37}{(A - V^{2/3} \alpha)^{1/2}} \dots\dots (1)$$

рассчитывали характеристическую температуру Дебая. Здесь A – средняя квадратичная атомная масса, V – молярный объем. [3]

Полученные значения для θ обоих соединений приведены в таблице.

Для вычисления модуля Юнга

$$\theta = \frac{1.6818\sqrt{E}}{M^{1/3} d^{1/6}} \dots\dots\dots (2)$$

использован формулу(2). Здесь цена Е дается единицей 10^6 кг/см², M- молярная масса, d- плотность.

Значение M и d входящие в расчетные формулы имели соответственно для соединений TlGaS₂ M=338.223 г/мол ; d=4.22 10^{-3} кг/м³ для соединений TlGaSe₂ M=431.64 г/мол; d=6.21 10^{-3} кг/м³. Результаты расчетов приведены в табл. 2.

Используя значения модуля Юнга (Е) и модуля сжатия (К), также рассчитывали коэффициент Пуассона (σ) и модуль сдвига (μ). Для этого использовались существующие формулы [5].

$$K = \frac{E}{3(1-2\sigma)} \dots\dots\dots (3)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1+\sigma)} \dots\dots\dots (4)$$

значения К определялись как K=1/X_T

Таблица 1

TlGaS ₂				TlGaSe ₂			
T ⁰ , К	$\alpha, 10^{-6}$ К ⁻¹	X _T , 10 ⁻¹² м ² /Н	θ , К	T ⁰ , К	$\alpha, 10^{-6}$ К ⁻¹	X _T , 10 ⁻¹² м ² /Н	θ , К
80	4,02	6,59	345	80	4,98	6,52	450
90	4,29	6,60	338	90	7,36	6,56	420
100	4,75	6,61	321	100	7,67	6,58	390
120	5,24	6,68	334	120	8,31	6,61	380
140	6,42	6,71	317	140	7,64	6,63	335
160	6,92	6,73	302	160	7,96	6,65	300
180	7,28	6,75	276	180	8,35	6,68	288
200	9,21	6,78	263	200	19,23	6,72	275
250	9,57	6,79	259	250	10,19	6,75	266
300	10,86	6,82	256	320	11,37	6,85	260

Таблица 2

TlGaS ₂					TlGaSe ₂				
T, К	$E, 10^{10}$ Н/м ²	$K, 10^{10}$ м ²	σ	$\mu, 10^{10}$ Н/м ²	T, К	$E, 10^{10}$ Н/м ²	$K, 10^{10}$ м ²	σ	$\mu, 10^{10}$ Н/м ²
80	6,30	15,22	0,438	2,20	80	10,31	15,31	0,38	3,71
90	6,26	15,15	0,438	2,18	90	9,96	15,23	0,39	3,58
100	6,09	15,12	0,433	2,13	100	9,61	15,12	0,39	3,44
120	6,07	14,90	0,432	2,12	120	9,53	15,11	0,39	3,41
140	6,06	14,89	0,432	2,12	140	9,42	15,09	0,40	3,37
160	5,92	14,81	0,431	2,06	160	8,43	15,07	0,40	2,99
180	5,66	14,70	0,432	1,97	180	8,32	14,93	0,41	3,15
200	5,64	14,62	0,446	1,96	200	8,06	14,84	0,41	2,86
250	5,47	14,58	0,447	1,90	250	7,93	14,81	0,41	2,81
300	5,47	14,51	0,448	1,90	300	7,84	14,53	0,42	2,78

Результаты расчетов показали, что значения коэффициентов теплового расширения и изотермического сжатия как в TlGaS₂, так и в TlGaSe₂ увеличиваются с ростом температуры.

Скачок значения этих параметров в соединении TlGaSe₂ в определенном интервале температур (105-120 K⁰) связан с переходом сегнетоэлектрической фазы в обычный

диэлектрик. В целом можно сказать, что изменение температурной зависимости α и X_T происходит при ослаблении химической связи между атомами в кристаллической решетке с повышением температуры.

Это изменение можно объяснить тем, что с повышением температуры в обоих соединениях относительная доля ковалентных связей в химической связи между атомами уменьшается, а относительная доля металлических связей увеличивается. Сравнение значений расчетных параметров упругости для соединений $TlGaS_2$ и $TlGaSe_2$ со значениями соответствующих параметров при температуре 300 К из литературы для металла также подтверждает указанное выше представление.

Относительно большой коэффициент Пуассона в обоих соединениях можно объяснить большей анизотропией механических свойств этих соединений. Следует отметить, что анизотропия механических свойств $TlGaSe_2$ больше, чем у $TlGaS_2$. Разумеется, эту мысль можно подтвердить прямым экспериментальным измерением механических параметров в разных направлениях в отдельных соединениях.

В результате исследования можно сделать вывод, что представленные в статье эмпирические и теоретические формулы применимы и для сложных полупроводниковых соединений.

ЛИТЕРАТУРА

1. М.М. Курбанов Тепловые засширение и изотермическая сжималност TlG_aS_2 Неорганические материалы 2003,том 39, №9, с.1062-1071
2. М.М. Курбанов Тепловые засширение и изотермическая сжималност TlG_aSe_2 Неорганические материалы 2003,том 37, №12, с.1447-1448
3. M.M. Qurbanov , M.M. Qocayev , S.C. Məmmədov, A. H. Dəmirov (TlG_aSe_2)_{1-x}(TlG_aS_2)_x (x= 0,1 ; 0,2) bərk məhlullarının istilik fiziki xassələri, Journal of Qafqaz university physics, vol 4 №1, 2016 p 75-79
4. Г.И. Зейналов, М.М. Курбанов, В.А. Гаджиев, Н.С.Сардарова изотермическая сжимаемост и некоторые параметры упругости сплавов системы TlG_aS_2 Неорганические материалы 2003,том 39, №4, с.409-411

IOT 621.315.592PACS: 72.40.+w

THERMAL QUENCHING OF PHOTOCURRENT IN CUIN₅S₈

BAYRAMOVA A.I.¹, GUSEINOV A.G.²
¹Azerbaijan University of Architecture and Construction²Baku State University*aynurabayramova09@gmail.com*

ABSTRACT

Single crystals of the defective semiconductor compound CuIn₅S₈ with a “normal” spinel structure were grown using the method of slow cooling of the melt at a constant temperature gradient. The crystals have high photosensitivity in the energy range of 1.0...2.0 eV. When the crystal was illuminated with white light in the temperature range of 150...250 K, thermal quenching of the photocurrent was detected. It is shown that thermal quenching of the photocurrent is due to a decrease in the lifetime of nonequilibrium current carriers due to the recharging of donor and acceptor levels created by anion and cation vacancies of the crystal lattice.

Keywords: CuIn₅S₈, photocurrent, donor, acceptor, vacancies, lifetime.

ТЕРМИЧЕСКОЕ ГАШЕНИЕ ФОТОТОКА В CUIN₅S₈

РЕЗЮМЕ

Методом медленного охлаждения расплава при постоянном градиенте температуры выращены монокристаллы дефектного полупроводникового соединения CuIn₅S₈ со структурой «нормальной» шпинели. Кристаллы обладают высокой фоточувствительностью в диапазоне энергии 1,0...2,0 эВ. При освещении кристалла белым светом в интервале температуры 150...250 К обнаружено термическое гашение фототока. Показано, что термическое гашение фототока обусловлено уменьшением времени жизни неравновесных носителей тока, за счет перезарядки донорных и акцепторных уровней, созданных анионными и катионными вакансиями кристаллической решетки.

Ключевые слова: CuIn₅S₈, фототок, доноры, акцепторы, вакансии, время жизни.

CUIN₅S₈-DƏ FOTO CƏRƏYANIN TERMIK SÖNMƏSİ

XÜLASƏ

Ərintinin sabit temperatur qradiyentli şəraitdə yavaş soyudulması üsulu ilə “normal” şpinel quruluşlu defektli yarımkənarıcı CuIn₅S₈ birləşməsinin monokristalları yetişdirilmişdir. Kristallar şüalanmanın 1,0...2,0 eV enerji diapazonunda yüksək fotohəssaslığa malikdirlər. 150...250 K temperatur diapazonunda kristalı ağ işıqla işıqlandırıldığda, temperaturun artması ilə fotocərəyanın termik sönməsi aşkar edilmişdir. Göstərilir ki, qızdırılmaqla fotocərəyanın termik sönməsi kristal qəfəsin anion və kation vakansiyalarının yaratdığı donor və akseptor səviyyələrinin yüksəlmə nisbətlərinin dəyişməsi hesabına qeyri-nlfplqlı yükdaşıyıcıların yaşama müddətinin azalması ilə əlaqədardır.

Açar sözlər: CuIn₅S₈, fotocərəyan, donor, akseptor, vakansiyalar, yaşama müddəti.

1. Introduction

The CuIn₅S₈ compound crystallizes in the cubic spinel structure (space group O₇^h or Fd3m) and belongs to semiconductors with a defect structure. In the cationic sublattice of the crystal, 25% vacancies are formed, which mainly extinguish the influence of foreign impurities on the electrical and photoelectric properties of the crystal. Cationic and anionic vacancies of the crystal lattice in a complex form electrophysical and photoelectric

properties, which can be controlled by appropriately changing the ratios of the concentrations of these vacancies [1, p. 6005], [2, p. 157], [3, p. 14], [4, p. 1066].

Anionic lattice vacancies form donor levels in the band gap of the crystal, and cationic one's form acceptor levels. In [5, p. 604] determined the band gap of the crystal and the depth of donor levels with energies of 0.17 meV and 0.193 meV. The band gap of the crystal has a direct character with an energy of 1.44 eV at temperatures of 10...34 K. Starting from 45 K, with heating of the crystal to a temperature of 300 K, the band gap linearly decreases to a value of 1.345 eV. Possessing a high absorption coefficient [6, p. 32] and highly luminescent property [7, p. 3339] the CuIn₅S₈ compound is of great practical interest for optoelectronics and photonics. However, recently thin films of the CuIn₅S₈ compound have increasingly attracted the attention of researchers involved in the study of photocatalysis in the field of hydrogen production through the electrolytic decomposition of water [8, p. 7252], [9, p. 124994].

2. Research method

CuIn₅S₈ crystals were obtained by slow cooling of the melt (at a rate of 2.6 K/hour) at a constant temperature gradient. The resulting crystals were subjected to X-ray diffraction analysis, which revealed that the crystals have a normal spinel structure with lattice parameters $a = 10.674 \text{ \AA}$. The crystals had n-type conductivity, the concentration of current carriers was $4,1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ and the mobility of conduction electrons was $120 \text{ cm}^2/V \cdot s$.

The photoconductivity of the samples was measured in a stationary mode with constant illumination of the sample with radiation from a halogen lamp. The kinetics of photoconductivity was studied when the crystal was excited by pulses of the second harmonic radiation of an Nd³⁺: YAG laser in the converter synchronization modulation mode ($\lambda = 532 \text{ nm}$). The photocurrent pulses were recorded with a La Croy storage oscilloscope.

3. Discussion of research results and conclusions.

The photocurrent spectrum calculated for a single photon of rectangular CuIn₅S₈ samples is presented in Fig. 1. The long-wavelength edge of the photocurrent spectrum has an exponential character, and the maximum of the spectrum is located at 1.24 eV. This value corresponds to the energy of transition of electrons from the valence band to donor levels with a depth of 150 meV. The sum of these two energies is 1.39 eV, which corresponds to the value of the band gap found in [5, p. 604] and [6, p. 32]. The spectrum covers a wide radiation region (1...2.0 eV) and coincides with the region of intense radiation from the Sun on the Earth's surface.

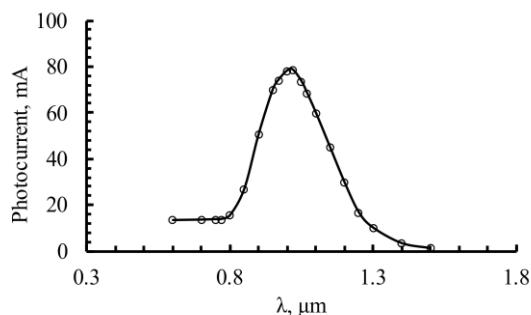


Fig. 1. Photocurrent spectrum of a CuIn₅S₈ crystal at 295 K.

The temperature dependence of the photocurrent generated by illuminating the crystal with white light with an intensity of 350 Lux is shown in Fig. 2. The dependence is complex, however, in the range of 175...250 K, thermal quenching of photoconductivity clearly occurs due to recharging of impurity levels. In works [10, p. 57] and [6, p. 32] show that crystals contain deep and shallow donor and acceptor levels, which, depending on their location in the band gap, behave as r- and s-centers.

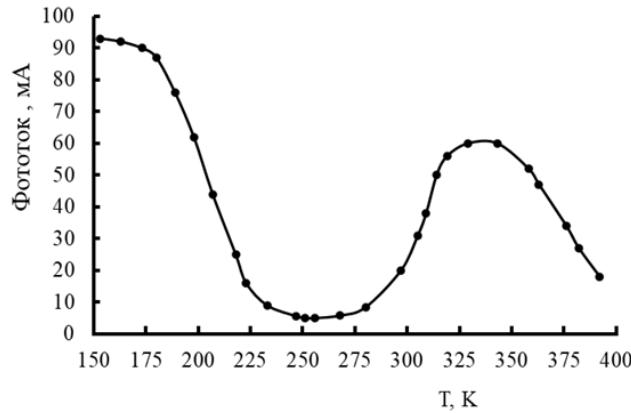


Fig. 2. Temperature dependence of the photocurrent in the CuIn₅S₈ crystals.

Probably, the features of thermal quenching of the photocurrent in CuIn₅S₈ are because of thermal recharging of not two, but several types of r- and s-centers. As a result of recharging of recombination centers, in this case, with increasing temperature, the lifetime of nonequilibrium current carriers decreases. The temperature dependences of the carrier lifetime are expressed by the relations:

$$\tau_n = (1 + x_r)^{-1} \tau_n^0 \text{ and } \tau_p = (1 + \frac{x_r}{g_r})(1 + x_r)^{-1} \tau_p^0$$

where, $x_r = \frac{g_s c_{pr} N_{vr}}{c_{nrr} n}$ – dimensionless quantity, g_r and g_s – recombination rate of r- and s-centers. The τ_n activation mechanism is possible during thermal exchange between s-centers and the valence band. In this case, it is necessary that the s-centers be located closer to the valence band than the r-centers and have a sufficient concentration of holes at low temperatures. Similar conditions are fully ensured in CuIn₅S₈ crystals due to the presence and location in the band gap of donor-acceptor levels caused by cationic and anionic vacancies of the crystal lattice.

The lifetime of nonequilibrium current carriers created by exposing the crystal to pulses of laser radiation with a duration of 12 ns and a wavelength of 532 nm was determined by measuring the kinetics of the photocurrent. Figure 3 shows the photocurrent kinetics curves in CuIn₅S₈ at temperatures of 155 and 250 K. At low temperatures, the $I_{ph}(t)$ dependence is exponential; the lifetime of nonequilibrium carriers, determined from curve (a), is 25 μ s. With increasing temperature, the nature of photocurrent relaxation changes and a slow capture of electrons by shallow acceptor levels depleted by laser radiation is observed.

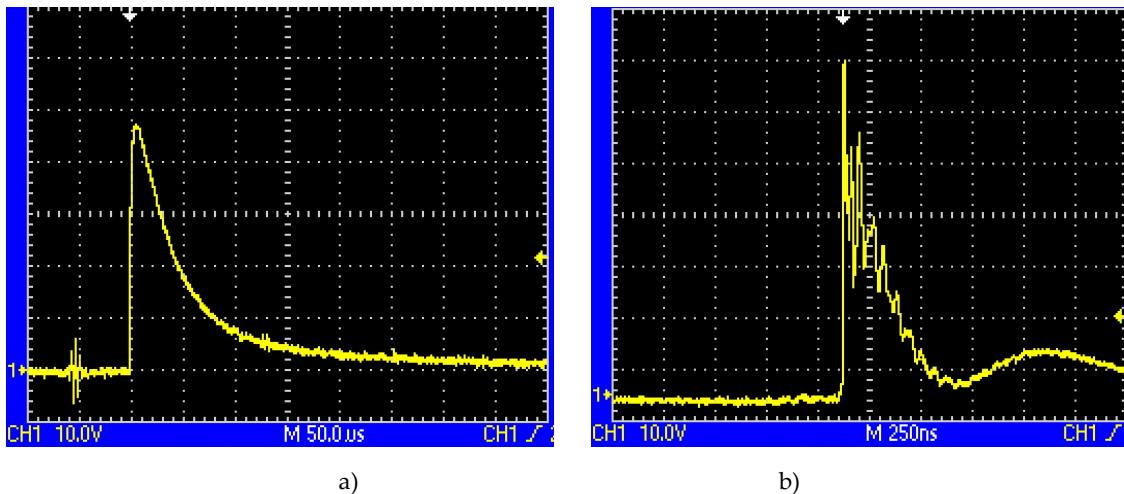


Fig. 2. Кинетика фототока в CuIn₅S₈ при температурах 155(а) и 250 K (б), после возбуждения импульсом лазерного излучения длительностью 12 нс.

However, the lifetime of nonequilibrium carriers can be determined from the decay of the photocurrent relaxation curve with a small error. At 250 K the lifetime is 120 ns. As can be seen, in the temperature range 155...250 K, the lifetime of nonequilibrium current carriers decreases by one order of magnitude. The photocurrent is quenched in the same order in a given temperature range. Consequently, the quenching of the photocurrent in CuIn₅S₈ is caused by recharging of impurity levels, which led to a decrease in the lifetime of nonequilibrium current carriers in the temperature range of 150...250 K.

REFERENCES

1. **Gannouni M., Kanzari M.** Journal of Alloys and Compounds. (2011), Volume 509, Issue 20, Pages 6004-6008.
2. **Makhova L., Szargan R., Konovalov I.** Thin Solid Films. (2005), Volume 472, Issues 1–2, Pages 157-163.
3. **Mehmet Isik, Nizami Gasanly.** Journal of Physics and Chemistry of Solids, Volume 91, (2016), Pages 13-17.
4. **Qasrawi A. F., Gasanly N. M.** Crystal Research and Technology. Volume 38, Issue 12, (2003), Pages 1063-1070.
5. **Bodnar I. V.** Semiconductors, (2012), Vol. 46, No. 5, pp. 602–605.
6. **Khemiri N., Kanzari M.** Solid State Communications. (2013), Volume 160, Pages 32-36.
7. **Seok-Joo Lee, Jae-Eun Kim, Hae Yong Park.** Japanese Journal of Applied Physics, (2003), Volume 42, Number 6R, pp. 3337- 3340.
8. **Gannouni M., Ben Assaker I., Chtourou R.** International Journal of Hydrogen Energy. (2015), Volume 40, Issue 23, Pages 7252-7259.
9. **Hui Zhao, Jihai Duan, Zisheng Zhang, Weiwen Wang.** Fuel, , (2022), Volume 325p. 124993
10. **Bayramova A.I.** Journal of Baku Engineering University, Chemistry and Biology. (2021), Volume 5, Number 1, p. 54-58.

INSTRUCTIONS FOR AUTHORS

1. "The Baku Engineering University Journal-Physics" accepts original unpublished articles and reviews in the research field of the author.
2. Articles are accepted in English.
3. File format should be compatible with **Microsoft Word** and must be sent to the electronic mail (journal@beu.edu.az) of the Journal. The submitted article should follow the following format:
 - Article title, author's name and surname
 - The name of workplace
 - Mail address
 - Abstract and key words
4. The title of the article should be in each of the three languages of the abstract and should be centred on the page and in bold capitals before each summary.
5. **The abstract** should be written in **9 point** type size, between **100** and **150** words. The abstract should be written in the language of the text and in two more languages given above. The abstracts of the article written in each of the three languages should correspond to one another. The keywords should be written in two more languages besides the language of the article and should be at least three words.
6. **. UDC and PACS index** should be used in the article.
7. The article must consist of the followings:
 - Introduction
 - Research method and research
 - Discussion of research method and its results
 - In case the reference is in Russian it must be given in the Latin alphabet with the original language shown in brackets.
8. **Figures, pictures, graphics and tables** must be of publishing quality and inside the text. Figures, pictures and graphics should be captioned underneath, tables should be captioned above.
9. **References** should be given in square brackets in the text and listed according to the order inside the text at the end of the article. In order to cite the same reference twice or more, the appropriate pages should be given while keeping the numerical order. For example: [7, p.15].

Information about each of the given references should be full, clear and accurate. The bibliographic description of the reference should be cited according to its type (monograph, textbook, scientific research paper and etc.) While citing to scientific research articles, materials of symposiums, conferences and other popular scientific events, the name of the article, lecture or paper should be given.

Samples:

- a) **Article:** Demukhamedova S.D., Aliyeva İ.N., Godjayev N.M.. *Spatial and electronic structure of monomerrik and dimeric conapeetes of carnosine üith zinc*, Journal of structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
 - b) **Book:** Christie John Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, p.386-398, 2002
 - c) **Conference paper:** Sadychov F.S., Aydin C., Ahmedov A.I.. Appligation of Information – Commu-nication Technologies in Science and education. II International Conference."Higher Twist Effects In Photon- Proton Collisions", Baki, 01-03 Noyabr, 2007, ss 384-391
References should be in 9-point type size.
10. The margins sizes of the page: - Top 2.8 cm. bottom 2.8 cm. left 2.5 cm, right 2.5 cm. The article main text should be written in Palatino Linotype 11 point type size single-spaced. Paragraph spacing should be 6 point.
 11. The maximum number of pages for an article should not exceed 15 pages
 12. The decision to publish a given article is made through the following procedures:
 - The article is sent to at least to experts.
 - The article is sent back to the author to make amendments upon the recommendations of referees.
 - After author makes amendments upon the recommendations of referees the article can be sent for the publication by the Editorial Board of the journal.

YAZI VƏ NƏŞR QAYDALARI

1. "Journal of Baku Engineering University" Fizika- əvvəller nəşr olunmamış orijinal əsərləri və müəllifin tədqiqat sahəsi üzrə yazılmış icmal məqalələri qəbul edir.
2. Məqalələr İngilis dilində qəbul edilir.
3. Yazilar Microsoft Word yazı programında, (journal@beu.edu.az) ünvanına göndərilməlidir. Göndərilən məqalələrdə aşağıdakılara nəzərə alınmalıdır:
 - Məqalənin başlığı, müəllifin adı, soyadı,
 - İş yeri,
 - Elektron ünvanı,
 - Xülasə və açar sözlər.
4. **Məqalədə başlıq hər xülasədən əvvəl** ortada, qara və böyük hərflə xülasələrin yazıldığı hər üç dildə olmalıdır.
5. **Xülasə** 100-150 söz aralığında olmaqla, 9 punto yazı tipi böyüklüyündə, məqalənin yazıldığı dildə və bundan əlavə yuxarıda göstərilən iki dildə olmalıdır. Məqalənin hər üç dildə yazılmış xülasəsi bir-birinin eyni olmalıdır. Açıq sözlər uyğun xülasələrin sonunda onun yazıldığı dildə verilməklə ən azı üç sözdən ibarət olmalıdır.
6. Məqalədə UOT və PACS kodları göstərilməlidir.
7. Məqalə aşağıdakılardan ibarət olmalıdır:
 - Giriş,
 - Tədqiqat metodu
 - Tədqiqat işinin müzakirəsi və onun nəticələri,
 - İstinad ədəbiyyatı rus dilində olduğu halda orjinal dili mötərzə içərisində göstərməklə yalnız Latin əlifbası ilə verilməlidir.
8. **Şəkil, rəsm, grafik və cədvəllər** çapda düzgün, aydın çıxacaq vəziyyətdə və mətn içərisində olmalıdır. Şəkil, rəsm və grafiklərin yazıları onların altında yazılmalıdır. Cədvəllərdə başlıq cədvəlin üstündə yazılmalıdır.
9. **Mənbələr** mətn içərisində kvadrat mötərizə daxilində göstərilməklə məqalənin sonunda mətn daxilindəki sıra ilə düzülməlidir. Eyni mənbəyə iki və daha çox istinad edildikdə əvvəlki sıra sayı saxlanmaqla müvafiq səhifələr göstərilməlidir. Məsələn: [7,səh.15].

Ədəbiyyat siyahısında verilən hər bir istinad haqqında məlumat tam və dəqiq olmalıdır. İstinad olunan mənbənin bibliografiya təsviri onun növündən (monoqrafiya, dərslik, elmi məqalə və s.) asılı olaraq verilməlidir. Elmi məqalələrə, simpozium, konfrans, və digər nüfuzlu elmi tədbirlərin materiallarına və ya tezislərinə istinad edərkən məqalənin, məruzənin və ya tezisin adı göstərilməlidir.

Nümunələr:

- a) **Məqalə:** Demukhamedova S.D., Aliyeva İ.N., Godjayev N.M.. *Spatial and electronic structure af monomeric and dimeric complexes of carnosine with zinc*, Journal of structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
- b) **Kitab:** Christie ohn Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, 2002
- c) **Konfrans:** Sadychov F.S., Aydin C., Ahmedov A.İ.. Appligation of Information-Communication Technologies in Science and education. II International Conference. "Higher Twist Effects In Photon- Proton Collisions", Baki, 01-03 Noyabr, 2007, ss 384-391

Mənbələr 9 punto yazı tipi böyüklüyündə olmalıdır.

10. **Səhifə ölçüləri:** üstdən 2.8 sm, altdan 2.8 sm, soldan 2.5 sm və sağdan 2.5 sm olmalıdır. Mətn 11 punto yazı tipi böyüklüyündə, **Palatino Linotype** yazı tipi ilə və tək simvol aralığında yazılmalıdır. Paraqraflar arasında 6 punto yazı tipi aralığında məsafə olmalıdır.
11. Orijinal tədqiqat əsərlərinin tam mətni bir qayda olaraq 15 səhifədən artıq olmamalıdır.
12. Məqalənin nəşrə təqdimi aşağıdakı qaydada aparılır:
 - Hər məqallə ən azı iki ekspertə göndərilir.
 - Ekspertlərin tövsiyələrini nəzərə almaq üçün məqalə müəllifə göndərilir.
 - Məqalə, ekspertlərin tənqidini qeydləri müəllif tərəfindən nəzərə alındıqdan sonra Jurnalın Redaksiya Heyəti tərəfindən çapa təqdim oluna bilər.

YAZIM KURALLARI

1. "Journal of Baku Engineering University-Physics" önceler yayımlanmamış orijinal çalışmaları ve yazarın kendi araştırma alanının-da yazılmış derleme makaleleri kabul etmektedir.
2. Makaleler İngilizce kabul edilir.
3. Makaleler Microsoft Word yazı programında, (journal@beu.edu.az) adresine gönderilmelidir. Gönderilen makalelerde şunlar dikkate alınmalıdır:
 - Makalenin başlığı, yazarın adı, soyadı,
 - İş yeri,
 - E-posta adresi,
 - Özeti ve anahtar kelimeler.
4. **Özet** 100-150 kelime arasında olup 9 font büyüğünde, makalenin yazıldığı dilde ve yukarıda belirtilen iki dilde olmalıdır. Makalenin her üç dilde yazılmış özeti birbirinin aynı olmalıdır. Anahtar kelimeler uygun özeti sonunda onun yazıldığı dilde verilmekle en az üç sözcükten oluşmalıdır.
5. Makalede UOT ve PACS tipli kodlar gösterilmelidir.
6. Makale şunlardan oluşmalıdır:
 - Giriş,
 - Araştırma yöntemi
 - Araştırma
 - Tartışma ve sonuçlar,
 - İstinat Edebiyatı Rusça olduğu halde orjinal dili parantez içerisinde göstermekle yalnız Latin alfabesi ile verilmelidir.
7. **Şekil, Resim, Grafik ve Tablolar** baskında düzgün çıkacak nitelikte ve metin içerisinde olmalıdır. Şekil, Resim ve grafiklerin yazıları onların alt kısmında yer almalıdır. Tablolarda ise başlık, tablonun üst kısmında bulunmalıdır.
8. **Kullanılan kaynaklar**, metin dâhilinde köşeli parantez içerisinde numaralandırılmalı, aynı sırayla metin sonunda gösterilmelidir. Aynı kaynaklara tekrar başvurulduğunda sıra muhafaza edilmelidir. Örneğin: [7, seh.15]. Referans verilen her bir kaynağın künnesi tam ve kesin olmalıdır. Referans gösterilen kaynağın türü de eserin türüne (monografi, derslik, ilmî makale vs.) uygun olarak verilmelidir. İlmi makalelere, sempozyum, ve konferanslara müracaat ederken makalenin, bildirinin veya bildiri özetlerinin adı da gösterilmelidir.

Örnekler:

- a) **Makale:** Demukhamedova S.D., Aliyeva İ.N., Godjayev N.M.. *Spatial and Electronic Structure of Monomerik and Dimeric Conapeetes of Carnosine Üith Zinc*, Journal of Structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
- b) **Kitap:** Christie John Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, p.386-398, 2002
- c) **Kongre:** Sadychov F.S., Aydin C., Ahmedov A.İ. Appligation of Information-Communication Technologies in Science and education. II International Conference. "Higher Twist Effects In Photon- Proton Collisions", Baki, 01-03 Noyabr, 2007, ss 384-391

Kaynakların büyüklüğü 9 punto olmalıdır.

9. **Sayfa ölçüleri;** üst: 2.8 cm, alt: 2.8 cm, sol: 2.5 cm, sağ: 2.5 cm şeklinde olmalıdır. Metin 11 punto büyütükte **Palatino Linotype** fontu ile ve tek aralıkta yazılmalıdır. Paragraflar arasında 6 puntoluk yazı mesafesinde olmalıdır.
10. Orijinal araştırma eserlerinin tam metni 15 sayfadan fazla olmamalıdır.
11. Makaleler dergi editör kurulunun kararı ile yayımlanır. Editörler makaleyi düzeltme için yazara geri gönderebilir.
12. Makalenin yayına sunusu aşağıdaki şekilde yapılır:
 - Her makale en az iki uzmana gönderilir.
 - Uzmanların tavsiyelerini dikkate almak için makale yazara gönderilir.
 - Makale, uzmanların eleştirel notları yazar tarafından dikkate alınından sonra Derginin Yayın Kurulu tarafından yayına sunulabilir.
13. Azerbaycan dışından gönderilen ve yayımlanacak olan makaleler için,(derginin kendilerine gönderilmesi zamanı posta karşılığı) 30 ABD Doları veya karşılığı TL, T.C. Ziraat Bankası/Üsküdar-İstanbul 0403 0050 5917 No'lu hesaba yatırılmalı ve makbuzu üniversitemize fakslanmalıdır.

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

1. «Journal of Baku Engineering University» - Физика публикует оригинальные, научные статьи из области исследования автора и ранее не опубликованные.
2. Статьи принимаются на английском языке.
3. Рукописи должны быть набраны согласно программы **Microsoft Word** и отправлены на электронный адрес (journal@beu.edu.az). Отправляемые статьи должны учитывать следующие правила:
 - Название статьи, имя и фамилия авторов
 - Место работы
 - Электронный адрес
 - Аннотация и ключевые слова
4. **Заглавие статьи** пишется для каждой аннотации заглавными буквами, жирными буквами и располагается по центру. Заглавие и аннотации должны быть представлены на трех языках.
5. **Аннотация**, написанная на языке представленной статьи, должна содержать 100-150 слов, набранных шрифтом 9 punto. Кроме того, представляются аннотации на двух других выше указанных языках, перевод которых соответствует содержанию оригинала. Ключевые слова должны быть представлены после каждой аннотации на его языке и содержать не менее 3-х слов.
6. В статье должны быть указаны коды UOT и PACS.
7. Представленные статьи должны содержать:
 - Введение
 - Метод исследования
 - Обсуждение результатов исследования и выводов.
 - Если ссылаются на работу на русском языке, тогда оригинальный язык указывается в скобках, а ссылка дается только на латинском алфавите.
8. **Рисунки, картинки, графики и таблицы** должны быть четко выполнены и размещены внутри статьи. Подписи к рисункам размещаются под рисунком, картинкой или графиком. Название таблицы пишется над таблицей.
9. **Ссылки** на источники даются в тексте цифрой в квадратных скобках и располагаются в конце статьи в порядке цитирования в тексте. Если на один и тот же источник ссылаются два и более раз, необходимо указать соответствующую страницу, сохраняя порядковый номер цитирования. Например: [7, стр.15]. Библиографическое описание ссылаемой литературы должно быть проведено с учетом типа источника (монография, учебник, научная статья и др.). При ссылке на научную статью, материалы симпозиума, конференции или других значимых научных мероприятий должны быть указаны название статьи, доклада или тезиса.

Например:

- a) **Статья:** Demukhamedova S.D., Aliyeva I.N., Godjayev N.M. *Spatial and electronic structure of monomeric and dimeric complexes of carnosine with zinc*, Journal of Structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
- b) **Книга:** Christie on Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, 2002
- c) **Конференция:** Sadychov F.S, Fydin C, Ahmedov A.I. Appligation of Information-Communication Nechnologies in Science and education. II International Conference. "Higher Twist Effects In Photon-Proton Collision", Bakı,01-03 Noyabr, 2007, ss.384-391

Список цитированной литературы набирается шрифтом 9 punto.

10. **Размеры страницы:** сверху 2.8 см, снизу 2.8 см, слева 2.5 и справа 2.5. Текст печатается шрифтом **Palatino Linotype**, размер шрифта 11 punto, интервал-одинарный. Параграфы должны быть разделены расстоянием, соответствующим интервалу 6 punto.
11. Полный объем оригинальной статьи, как правило, не должен превышать 15 страниц.
12. Представление статьи к печати производится в ниже указанном порядке:
 - Каждая статья посыпается не менее двум экспертом.
 - Статья посыпается автору для учета замечаний экспертов.
 - Статья, после того, как автор учел замечания экспертов, редакционной коллегией журнала может быть рекомендована к печати.