

# AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

*Əlyazması hüququnda*

## **PEROVSKİTLƏRDƏ VƏ HEKSAFERRİTLƏRDƏ TƏZYİQ VƏ TEMPERATURUN TƏSİRİ İLƏ QURULUŞ VƏ MAQNİT FAZA KEÇİDLƏRİ**

İxtisas: 2223.01 – Kristalloqrafiya, kristallar fizikası

Elm sahəsi: Fizika

İddiaçı: **Sakin Həmid oğlu Cabarov**

Elmlər doktoru elmi dərəcəsi  
almaq üçün təqdim edilmiş dissertasiyanın

### **AVTOREFERATI**

**Bakı – 2021**

Dissertasiya işi Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutunun “Qeyri - standart nəzarət və diaqnostika” laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

Elmi məsləhətçi: texnika elmləri doktoru, professor  
**Əli İsa oğlu Məmmədov**

Rəsmi opponentlər: AMEA-nın müxbir üzvü,  
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor  
**Aydın Həsən oğlu Kazımzadə**  
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor  
**Kərim Rəhim oğlu Allahverdiyev**  
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor  
**Məhəmmədəli Məzahir oğlu Zərbəliyev**  
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor  
**Mayıl Məsim oğlu Tağiyev**

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Ali Attestasiya Komissiyasının Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutu nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya şurası

Dissertasiya şurasının sədri:

AMEA-nın həqiqi üzvü,  
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor  
**Nazim Timur oğlu Məmmədov**

Dissertasiya şurasının elmi katibi:

fizika elmləri doktoru, dosent  
**Rəfiqə Zabil qızı Mehdiyeva**

Elmi seminarın sədri:

fizika elmləri doktoru, professor  
**İmaməddin Rəcəbəli oğlu Əmiraslanov**



## **İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI**

**Mövzunun aktuallığı və işlənmə dərəcəsi.** Təqdim edilən dissertasiya işi bir sıra maraqlı fiziki hadisələrin müşahidə edildiyi seqnetoelektrik və maqnit xassələrə malik olan perovskit və heksaferrit birləşmələrin sintezinə, alınmış polikristalların kristal və maqnit quruluşlarına yüksək təzyiqin, yüksək və aşağı temperaturların təsirinin tədqiqinə istiqamətləndirilmişdir. Perovskit quruluşa malik olan birləşmələr geniş tətbiq sahələri olan müxtəlif fiziki xassələrə malik funksional materiallar olduqlarından kondensə olunmuş hal fizikasında geniş tədqiq edirlər. Sadə kristal quruluşa malik olduqlarından perovskit birləşmələrdən nəzəri tədqiqatlar zamanı model obyektlər kimi də istifadə edilir. Heksaferritlər kifayət qədər mürəkkəb quruluşa malik olmalarına baxmayaraq, yüksək simmetriyalı olduqlarına görə dayanıqlı kristal quruluşludurlar. Bundan başqa geniş temperatur intervalında seqnetoelektrik və ferrimaqnit xassələrinə malik olduqlarına görə, son dövrlərdə bu birləşmələr maraqlı tədqiqat obyektləri kimi tədqiqatçıların diqqətini cəlb etmişdir.

$ABO_3$  perovskit tipli birləşmələr kifayət qədər sadə kristal quruluşa malik olduqlarına görə, perovskit seqnetoelektrikləri müxtəlif fiziki parametrlərin nəzəri hesablamaları üçün, seqnetoelektrik effektini təsəvvür etmək, maqnitoelektrik effektinin inkişaf modelini qurmaq və başqa mürəkkəb fiziki hadisələrin izahı üçün uyğun model obyekt kimi istifadə edilirlər. Perovskitlər arasında həm seqnetoelektrik ( $BaTiO_3$ ,  $PbTiO_3$  və s.), həm də ferromaqnit xassələrə malik birləşmələrə ( $BaMnO_3$ ,  $SrMnO_3$  və s.) rast gəlinir. Perovskitlərdə yaranan spontan polyarlaşmanın əsas səbəbi  $BO_6$  oktaedrlərinin mərkəzində yerləşən B metal atomlarının öz ideal mövqelərindən sürüşməsi, ferromaqnit xassələrinin yaranmasının səbəbi isə,  $BO_6$  oktaedrlərinin mərkəzlərində yerləşən B maqnit xassələrinə malik olan metal atomlarının uzaq maqnit nizamlılığı yaratmasıdır.

Elə perovskit birləşmələr də vardır ki, həm seqnetoelektrik, həm də ferromaqnit xassələrə malikdirlər ki, belə birləşmələr multiferroiklər adlanırlar. Bunlara nümunə olaraq bismut manqanat

birləşməsinə göstərmək olar. Son zamanlarda seqnetoelektrik (və ya antiseqnetoelektrik) xassələrə malik olan klassik perovskitlərdə diamaqnit metal atomlarının maqnit atomları ilə qismən əvəzlənməsi nəticəsində ferromaqnit (və ya antiferromaqnit) xassələrə malik birləşmələr sintez edilirlər.  $\text{BaTiO}_3$  əsasında alınmış  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  və  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$  birləşmələrində fərqli kristal quruluşların yaranması və uzaq maqnit nizamlılığının əmələgəlmə mexanizminin öyrənilməsi çox vacibdir.

Maqnit xassələrinə malik olan birləşmələr arasında kobalt tərkibli birləşmələr xüsusi yer tutur. Müxtəlif kristallik mövqələrdə dayanan Co atomlarının əmələ gətirdikləri uzaq maqnit nizamlılığının əmələgəlmə mexanizminin öyrənilməsi üçün  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  perovskitəbənzər mürəkkəb oksidin quruluş və maqnit xassələrinin geniş temperatur və təzyiqlə intervalında tədqiqi çox əhəmiyyətlidir.

Heksaferrit multiferroiklər kifayət qədər dayanıqlı kristal quruluşa malik və geniş temperatur diapazonunda sabit fiziki xassələrə malik olduqlarına görə elektrik və maqnit xassələri ilə idarə edilməsi mümkün olan fərqli texnoloji tətbiqlər üçün unikal materiallar hesab edilirlər.  $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$  heksaqonal birləşməsi və Fe atomlarının qismən diamaqnit metal atomları ilə əvəzlənməsi əsasında alınmış birləşmələr son zamanlar ən çox tədqiq edilən materiallardır. Barium heksaferrit geniş temperatur intervalında ( $T_C \sim 750 \text{ K}$ ) ferrimaqnit xassələrə malikdir. Təcrübi tədqiqatlar göstərir ki, Fe atomlarının Al, In, Ga, Sc və s. diamaqnit atomları ilə qismən əvəz edilməsi zamanı bu birləşmələr yüksək temperaturda oblastında maqnit xassələrinə malik olurlar. Barium heksaferrit və onun əsasında alınmış bərk məhlullar elektromaqnit uducu materiallar hesab edildikləri üçün aviasiya texnologiyalarında, kosmik cihazqayırmada və əsasən də radardan qorunma sistemlərində örtük materialı kimi geniş tətbiq olunurlar.

Multiferroiklər maqnit sahəsinin təsiri ilə elektrik xassələrini və əksinə, elektrik sahəsinin təsiri ilə maqnit xassələrini idarə etmək üçün müxtəlif çeviricilərin alınmasında mühüm materiallar hesab olunurlar. Bu materialların yüksək təzyiqlərdə, aşağı və yüksək

temperaturalarda tədqiqi zamanı alınmış nəticələr, ekstremal istismar şəraitində istifadə edilməsi mümkün olan çeviricilərin istehsalı üçün çox vacibdir. Göstərilən birləşmələrin fiziki xassələrinin tam anlaşılması, onların müxtəlif xassələrinin kristal quruluşdan asılılığını öyrənmək üçün bu birləşmələrin kristal quruluşlarını atom səviyyəsində öyrənmək lazımdır. Birləşmələrin kristal quruluşlarının dəqiq öyrənilməsi, qəfəs parametrlərinin, atom koordinatlarının, atomlararası məsafələrin və rabitələrarası bucaqların təyini, bu birləşmələrin malik olduqları müxtəlif fiziki xassələrin izah edilməsinə kömək olur. Spontan polyarlaşmaya malik olan materialların (seqnetoelektriklərin) fiziki xassələri birbaşa kristal quruluşda atomların ideal mövqelərindən müəyyən qədər sürüşmələri ilə izah edildiklərinə görə, bu materiallarda atom səviyyələrinin dəqiq öyrənilməsinə daha çox ehtiyac vardır. Materialların fiziki xassələri ilə onların kristal və maqnit quruluşları arasındakı qarşılıqlı əlaqənin və kimyəvi rabitələrin xarakterinin müəyyən edilməsi, sənaye texnologiyasında istifadəsi üçün fiziki hadisələrin mikroskopik mexanizmlərinin öyrənilməsi kondensə olunmuş hal fizikasının, kristallofizikanın və ümumilikdə materialşünaslığın əsas məsələlərindəndir. Təzyiq və temperatur kimi termodinamik parametrlərin geniş intervalında tədqiqatların aparılması, yeni quruluş və maqnit fazalarının alınması, yuxarıda sadalanan məsələlərin həlli üçün perspektiv metoddur.

#### **Tədqiqatın məqsəd və vəzifələri:**

Dissertasiya işinin məqsədi yüksək təzyiqlərdə, yüksək və aşağı temperaturalarda perovskit və heksaferrit quruluşlu, seqnetoelektrik və maqnit xassələrə malik birləşmələrin ovuntu polikristallarının kristal və maqnit quruluşlarını, atom dinamikalarını tədqiq etməklə birləşmələrdə müşahidə edilən quruluş çevrilmələri və faza keçidlərinin mexanizminin müəyyənləşdirilməsidir.

Qoyulan məqsədə çatmaq üçün aşağıdakı məsələlər həll edilmişdir:

- BaTiO<sub>3</sub> birləşməsində Ti atomlarının Mn atomları ilə qismən əvəzləmələrinin aparılması, alınmış BaTi<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>O<sub>3</sub> ( $0 \leq x \leq 0.5$ ) birləşmələrinin kristal quruluşlarının, atom dinamikalarının və

bu sistemlərdə maqnetizmin əmələgəlmə mexanizminin quruluş aspektlərinin tədqiqi.

- Yüksək təzyiqlərdə  $\text{BaTi}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_3$  birləşməsində quruluş faza keçidlərinin tədqiqi. Yüksək təzyiqin təsiri ilə müxtəlif quruluş fazalarında bu birləşmədəki atomların rəqs modalalarının və qəfəs parametrlərinin dəyişmə mexanizminin öyrənilməsi.
- Yüksək təzyiqlərdə və aşağı temperaturlarda perovskitə bənzər  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  birləşməsinin quruluş və maqnit xassələrinin tədqiqi. Aşağı temperaturlarda və yüksək təzyiqlərdə P-T faza diaqramının qurulması. Neel temperaturunun təzyiqdən asılı olaraq dəyişmə mexanizminin müəyyən edilməsi.
- Aşağı temperaturlar intervalında  $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$  birləşməsinin kristal və maqnit quruluşlarının tədqiqi. İkiqat perovskitlərdə müxtəlif kristalloqrafik mövqələrdə dayanan Mn və Fe atomlarının növbələşməsinin maqnit quruluşa təsirinin öyrənilməsi.
- $\text{YMnO}_3$  və  $\text{LuMnO}_3$  və perovskit maqnitlərinin kristal quruluşlarına və atom dinamikalarına yüksək təzyiqin təsirinin tədqiqi. Bu birləşmələr üçün Berç-Murnaqaqna tənliyinin həlli, hərtərəfli sıxılma modulunun və xətti sıxılma əmsallarının müəyyənləşdirilməsi.
- Yüksək təzyiqin təsiri ilə yüksək temperaturlar intervalında  $\text{BiMnO}_3$  multiferroik birləşməsinin kristal quruluşunun və quruluş faza keçidlərinin tədqiqi. Faza keçidi temperaturunun təzyiqdən asılılığının alınması və P-T faza diaqramının qurulması.
- $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$  heksoferritində Fe atomlarının Ga atomları ilə qismən əvəz edilməsi ilə alınmış  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$  birləşmələrinin kristal quruluşunun və atom dinamikasının öyrənilməsi. Ga atomlarının  $x$  konsentrasiyasında asılı olaraq quruluş xassələrinin dəyişmə mexanizminin tədqiq edilməsi.
- Yüksək təzyiqlər oblastında  $\text{BaFe}_{11.1}\text{Ga}_{0.9}\text{O}_{19}$  və  $\text{BaFe}_{11.1}\text{In}_{0.9}\text{O}_{19}$  birləşmələrinin kristal quruluşunun tədqiqi.  $\text{BaFe}_{11.1}\text{Ga}_{0.9}\text{O}_{19}$  və  $\text{BaFe}_{11.1}\text{In}_{0.9}\text{O}_{19}$  heksoferritlərinin hərtərəfli sıxılma modulunun və xətti sıxılma əmsallarının təyini.

**Tədqiqat metodları:** Tədqiqat obyektləri perovskit və heksaferrit kristallik quruluşlu mürəkkəb oksidlərdir:  $BaTi_{1-x}Me_xO_3$  ( $Me = Mn, Fe$ ) birləşmələri, barium titanat klassik seqnetoelektriki əsasında alınmış yeni multiferroik birləşmələrdir. Perovskitəbənzər kobaltlar, ferritlər və maqnitlər ( $La_{0.7}Ca_{0.3}Mn_{0.5}Fe_{0.5}O_3$ ,  $Ca_3Co_2O_6$ ,  $BiMnO_3$ ,  $YMnO_3$ ,  $LuMnO_3$ ) fərqli kristal quruluşlara malik olan, antiferromaqnit və ferrimaqnit xassələri göstərən birləşmələrdir.  $BaFe_{12-x}Me_xO_{19}$  ( $Me = Ga, In$ ) birləşmələri heksaqonal kristal quruluşa malik olan və geniş temperatur oblastında ferrimaqnit xassələrə malik birləşmələrdir.

Nümunələrin faza analizlərini aparmaq və kristal quruluşlarının təyini üçün ənənəvi rentgen difraksiyası, sinxrotron şüalandırma və neytron difraksiyası metodlarından istifadə edilmişdir. Bu metodlar kristal quruluş haqqında məlumat almaq üçün ən etibarlı eksperimental metodlar kimi, bərk cisimlərin kristal quruluşlarında baş verən müxtəlif dəyişmələrin və faza keçidlərinin tədqiqi üçün mühüm alət hesab olunurlar. Müasir rentgen cihazları və sinxrotronlar geniş rentgen spektr diapozonunda və qısa müddət ərzində yüksək dəqiqlikli tədqiqatlar aparmağa imkan verir.

Kristal və maqnit quruluşların öyrənilməsi üçün ən dəqiq metodlardan biri də neytron difraksiyası metodudur. Neytronoqrafiya tərkibində yüngül element atomları və yaxın sıra nömrələrinə malik element atomlarının olduğu birləşmələrin və onların bərk məhlullarının kristal və maqnit quruluşlarını öyrənməyə imkan verir ki, bir çox hallarda rentgen quruluş analizinin köməkliyi ilə bunları kifayət qədər dəqiq təyin etmək mümkün deyil. Çünki rentgen şüalarından fərqli olaraq neytronlar kristal quruluşu əmələ gətirən atomların nüvələrindən səpilir. Neytronların spin maqnit momentinə malik olmaları neytronoqrafiya metodu ilə tədqiqatlar aparılarkən müxtəlif maqnit xassələrinə malik olan birləşmələrin tədqiqində yalnız kristal quruluşları deyil, həm də onların maqnit xassələri haqqında məlumat almağa imkan verir.

Rentgen və neytron difraksiyası metodları ilə alınmış difraksiya spektrləri, Ritveld metodu vasitəsi ilə “MRIA”, “VMRIA” və “FullProf” proqram paketlərində analiz edilmişdir. Kristal

quruluşların qurulmasında DIAMOND 3.2, parametrlərin dəyişmə mexanizmin öyrənilməsində isə Origin 9 proqramlarından istifadə edilmişdir.

Tədqiqat materiallarının atom dinamikaları Raman spektroskopiyası metodu ilə tədqiq edilmişdir. Alınmış Raman spektrləri “Origin” proqramı vasitəsilə analiz edilmişdir.

Yüksək təzyiqlərin alınması zamanı ən müasir texnologiyalardan istifadə edilmişdir. Neytron difraksiyası tədqiqatları zamanı sapfir zindanlardan, Raman spektroskopiyası zamanı isə almaz zindanlardan istifadə edilmişdir. Sinxrotron şüalandırma metodu ilə rentgen difraksiyası tədqiqatları zamanı isə həm almaz zindanlardan, həm də volfram karbid (WC) zindanlardan istifadə edilmişdir. Yüksək təzyiqlərin alınması üçün bu zindanlardan istifadə edilən metodların hər biri təzyiq qradientinin minimuma endirilməsi və hidrostatik təzyiğin alınması üçün ən unikal metodlardır.

#### **Müdafiə çıxarılan əsas müddəalar:**

1.  $BaTi_{1-x}Mn_xO_3$  ( $0 \leq x \leq 0.12$ ) birləşmələrində yeni quruluş fazalarının yaranması.  $T \approx 400$  K temperaturda  $BaTi_{0.99}Mn_{0.01}O_3$  birləşməsində tetraqonal (seqnetoelektrik) fazadan kubik (paraelektrik) fazaya quruluş çevrilməsi.
2.  $BaMn_{1-x}Ti_xO_3$  ( $0 \leq x \leq 0.25$ ) birləşmələrində antiferromaqnit fazanın yaranması. Aşağı temperaturlar oblastında antiferromaqnit-paramaqnit faza keçidi. Neel temperaturunun Ti atomlarının konsentrasiyasından asılı olaraq azalması.
3.  $BaFe_{1-x}Ti_xO_3$  ( $0.05 \leq x \leq 0.2$ ) birləşmələrində uzaq maqnit nizamlılığının yaranması. Aşağı temperaturlar oblastında ferromaqnit-paramaqnit faza keçidi.
4.  $BaTi_{0.99}Fe_{0.01}O_3$  birləşməsində  $P \approx 19$  GPa təzyiqdə tetraqonal quruluşdan kubik quruluşa seqnetoelektrik-paraelektrik faza keçidi.
5.  $Ca_3Co_2O_6$  birləşməsinin P-T faza diaqramı. Aşağı temperaturlar oblastında antiferromaqnit-paramaqnit faza keçidi. Yüksək təzyiğin təsiri artdıqca Neel temperaturunun qiymətinin  $dT_N/dP = 3.04$  K/GPa əmsalı ilə artması.



6. İlk dəfə  $\text{GaFeO}_3$  multiferroikində P-T faza diaqramı.  $P \approx 21$  GPa təzyiqdə polyar ortorombik fazadan qeyri-polyar ortorombik fazaya quruluş faza keçidi.
7.  $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$  birləşməsinin maqnit quruluşu.  $T_N \approx 346$  K Neel temperaturunda ferromaqnit-paramaqnit faza keçidi.
8.  $P \approx 0-30$  GPa təzyiq intervalında  $\text{YMnO}_3$ ,  $\text{LuMnO}_3$  maqnitlərin kristal quruluşları və atom dinamikaları. Bu birləşmələr üçün Berç–Murnaqaq tənliyinin həlli.
9.  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$  ( $0.1 \leq x \leq 1.2$ ) birləşmələrinin quruluş xəssələrinin Ga atomlarının konsentrasiyasından asılılıqları. Qəfəs parametrlərinin və atomların rəqs modalalarının Ga-un konsentrasiyasından asılılığı.
10. Yüksək təzyiq intervalında  $\text{BaFe}_{11.1}\text{Ga}_{0.9}\text{O}_{19}$  ( $P = 0-5.3$  GPa) və  $\text{BaFe}_{11.1}\text{In}_{0.9}\text{O}_{19}$  ( $P = 0-5.5$  GPa) birləşmələrinin kristal quruluşları. Bu birləşmələr üçün Berç–Murnaqaq tənliyinin həlli, hərtərəfli və xətti sıxılma əmsalları.

### **Tədqiqatın elmi yeniliyi:**

1. Perovskit kristal quruluşa malik klassik seqnetoelektrik  $\text{BaTiO}_3$  birləşməsində Ti atomlarının qismən Mn atomları ilə əvəzləmələri aparılmış və  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  ( $0 \leq x \leq 0.12$ ) birləşmələri sintez edilmişdir. Mn atomlarının konsentrasiyasından asılı olaraq yaranmış yeni quruluş fazaları tədqiq edilmiş, hər bir birləşmə üçün atom koordinatları, atomlararası məsafələr araşdırılmışdır.  $\text{BaTi}_{0.99}\text{Mn}_{0.01}\text{O}_3$  birləşməsində  $T \approx 400$  K temperaturda tetraqonal-kubik faza keçidi aşkar edilmişdir.
2. Heksaqonal kristal quruluşlu  $\text{BaMnO}_3$  antiferromaqnit birləşməsindəki Mn atomlarının Ti atomları ilə qismən əvəzləmələri aparılmış və  $\text{BaMn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$  ( $0 \leq x \leq 0.25$ ) birləşmələrində uzaq maqnit nizamlılığının formalaşması mexanizmləri öyrənilmişdir. Neel temperaturunun Ti atomlarının konsentrasiyasından asılı olaraq azalması asılılığı müəyyən edilmişdir.
3. Ti atomlarının  $0.05 \leq x \leq 0.2$  konsentrasiyası intervalında alınmış  $\text{BaFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$  birləşmələrində uzaq maqnit nizamlılığının əmələ gəlməsinin quruluş aspektləri müəyyən edilmişdir. Müşahidə

edilmişdir ki, titan atomlarının konsentrasiyası artdıqca Kuri temperaturunun qiyməti  $T_K = 133$  K-dən 70 K-ə qədər azalır.

4.  $BaTiO_3$  birləşməsində Ti atomlarının qismən Fe atomları ilə əvəz edilməsi nəticəsində alınmış  $BaTi_{0.99}Fe_{0.01}O_3$  birləşməsinin kristal quruluşu və atom dinamikası otaq temperaturunda yüksək təzyiğin təsiri ilə tədqiq edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki,  $P \approx 20$  GPa təzyiqdə tetraqonal quruluştan kubik quruluşa seqnetoelektrik-paraelektrik faza keçidi baş verir. Hər bir faza üçün qəfəs parametrlərinin dəyişmə mexanizmləri müəyyənləşdirilmişdir. Fərqli fazalar üçün Berç–Murnaghan hal tənliyi həll edilmiş və hərtərəfli sıxılma modulları müəyyən edilmişdir.

5. İlk dəfə  $Ca_3Co_2O_6$  mürəkkəb oksidinin geniş temperatur və təzyiq diapozonunda P-T faza diaqramı qurulmuşdur. Aşağı temperaturlar oblastında antiferrimaqnit-paramaqnit faza keçidi temperaturu  $T_N \approx 25$  K müəyyən edilmiş, Neel temperaturunun təzyiqdən asılılıq mexanizmi öyrənilmişdir. Yüksək təzyiğin təsiri ilə faza keçidi temperaturunun qiymətinin artması müşahidə edilmişdir.

6. İlk dəfə  $GaFeO_3$  multiferroikində  $P \approx 21$  GPa təzyiqdə polyar ortorombik fazadan qeyri-polyar ortorombik fazaya quruluş faza keçidi aşkar edilmişdir. Aşağı temperaturlar oblastında ferrimaqnit-paramaqnit faza keçidi temperaturu  $T_N \approx 292$  K müəyyən edilmişdir.

7.  $La_{0.7}Ca_{0.3}MeO_3$  (Me = Mn, Fe) birləşməsində Mn və Fe atomlarının bərabər konsentrasiyası ilə otaq temperaturunda bu birləşmədə uzaq maqnit nizamlılığının alınması müəyyən edilmişdir. Aşağı temperaturlar oblastında həm antiferromaqnit, həm də ferromaqnit klasterlərindən ibarət olan mürəkkəb maqnit quruluşu müşahidə edilmişdir.  $T_N \approx 346$  K temperaturda antiferromaqnit-paramaqnit faza keçidi aşkar edilmişdir.

8.  $BiMnO_3$  multiferroik birləşməsinin geniş temperatur və təzyiq intervalında P-T faza diaqramı qurulmuş, eyni zamanda ortorombik və monoklin fazanın mövcud olduğu yeni aralıq faza müşahidə edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, təzyiğin qiyməti artdıqca, aralıq fazanın mövcud olduğu temperatur intervalı da genişlənir.

9.  $P \approx 0-30$  GPa yüksək təzyiqlər intervalında heksaqonal kristal quruluşa malik olan  $YMnO_3$ ,  $LuMnO_3$  perovskitəbənzər

maqnitlərin kristal quruluşları və atom dinamikaları tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, göstərilən təzyiq intervalında heç bir faza keçidi baş vermir. Hər bir birləşmə üçün Berç–Murnaqaq hal tənliyi həll edilmiş və hərtərəfli sıxılma modulları müəyyən edilmişdir.

10. Fe atomlarının Ga atomları ilə qismən əvəz edilməsi ilə sintez edilmiş  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$  ( $0.1 \leq x \leq 1.2$ ) birləşmələrinin kristal quruluşlarında baş verən dəyişikliklərin Ga atomlarının konsentrasiyasından asılılıqları öyrənilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, Ga atomlarının  $0.1 \leq x \leq 1.2$  intervalında  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$  birləşmələri dayanıqlı heksaqonal kristal quruluşa malik olurlar. Qəfəs parametrlərində və atomlararası rabitələrin rəqs modalarında baş verən dəyişmələr, üç valentli Ga və Fe atomlarının ion radiuslarındakı fərqlə izah edilmişdir.

11. İlk dəfə barium heksaferritlərin yüksək təzyiqlərdə kristal quruluşları öyrənilmişdir. Otaq temperaturunda  $P = 0-5.3$  GPa yüksək təzyiqlər intervalında  $\text{BaFe}_{11.1}\text{Ga}_{0.9}\text{O}_{19}$  birləşməsinin kristal quruluşu tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, göstərilən təzyiq intervalında bu birləşmənin kristal quruluşunda heç bir faza keçidi baş vermir.  $\text{BaFe}_{11.1}\text{Ga}_{0.9}\text{O}_{19}$  heksaferriti üçün Berç–Murnaqaq tənliyi həll edilmiş və hərtərəfli sıxılma modulu müəyyən edilmişdir. Təcrübi nəticələrdən qəfəs parametrlərinin xətti sıxılma əmsalları hesablanmışdır.

12. İlk dəfə olaraq otaq temperaturunda  $P = 0-5.5$  GPa yüksək təzyiqlər intervalında  $\text{BaFe}_{11.1}\text{In}_{0.9}\text{O}_{19}$  heksaferritinin kristal quruluşu tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, göstərilən təzyiq intervalında bu birləşmədə quruluş faza keçidi baş vermir.  $\text{BaFe}_{11.1}\text{In}_{0.9}\text{O}_{19}$  heksaferriti üçün Berç–Murnaqaq tənliyi həll edilmiş və hərtərəfli sıxılma modulu və qəfəs parametrlərinin xətti sıxılma əmsalları hesablanmışdır.

**Tədqiqatın elmi və praktiki əhəmiyyəti:** Yüksək təzyiqlərdə, yüksək və aşağı temperaturlarda müxtəlif elektrik və maqnit xassələrinə malik olan birləşmələrin quruluş xassələri, qəfəs parametrləri, həmçinin quruluş parametrləri ilə maqnit xassələri arasında qarşılıqlı əlaqə haqqında alınmış məlumatlar

kristallofizikada, bərk cisimlər fizikasında, kondensə olunmuş hal fizikasında, materialşünaslıqda və kimyada - verilmiş xüsusiyyətlərə malik fərqli seqnetoelektriklərin və multiferroiklərin alınması üçün metodların inkişafı, fiziki xassələrinin mexanizmləri haqqında atom səviyyəsində müasir təsəvvürlərin inkişafı üçün mühüm əhəmiyyətə malikdir.

Perovskit seqnetoelektriklərin (antiseqnetoelektriklərin) və ferromaqnitlərin (antiferromaqnitlərin) bir neçə istiqamətdə texniki tətbiqləri vardır. Bunlardan aşağıdakıları xüsusi olaraq qeyd etmək olar: kiçik həcmli aşağı tezlikli böyük tutumlu kondensatorların hazırlanması, dielektrik gücləndiricələri üçün böyük qeyri-xətti polyarizasiyalı materialların istifadəsi, modulyatorların və başqa idarəetmə mexanizmləri, hesablama texnikasında yaddaş elementi kimi seqnetoelementlərin istifadəsi, lazer şüalanmasında çeviricilər və modulyasiya üçün seqnetoelektrik və antiseqnetoelektrik kristalların istifadəsi, pyezoelektrik və piroelektrik çeviricilərin hazırlanması.

Barium heksaferrit və onun bərk məhlulları, geniş temperatur və təzyiq oblastında öz kristal quruluşlarını saxladığına və maqnit xassələri göstərdiyinə görə, ekstremal istismar şəraitində işləyən qurğularda, müasir elektronikada və spintronikada maqnit-elektrik (və ya elektrik-maqnit) çevirici sistemləri kimi istifadə edilirlər. Bu birləşmələrin elektromaqnit dalğalarını udmaq xassəsinə görə, aviasiya texnologiyasında, kosmik cihazlarda və radardan qorunma sistemlərində geniş istifadə etmək olar.

#### **Aprobosiyası və tətbiqi:**

Dissertasiya işində alınmış elmi-tədqiqat nəticələri, respublika və beynəlxalq səviyyəli tədbirlərdə məruzə edilmişdir:

XXII Международное совещание и Международная молодежная конференция «Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния» РНИКС-2012, 15–19 октября 2012, Санкт-Петербург, Россия; Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutunun İ.M. Frank adına Neytron Fizikası Laboratoriyasının elmi-texniki seminarı, 13 aprel 2012-ci il, Dubna, Rusiya; International Conference on Nanoscale Magnetism

(ICNM2013), 02-06 September 2013, Istanbul, Turkey; Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutunun İ.M. Frank adına Neytron Fizikası Laboratoriyasının elmi-texniki seminarı, 5 dekabr 2013-cü il, Dubna, Rusiya; 1<sup>st</sup> International Scientific conference of young scientist and specialist, The role of multidisciplinary approach in solution of actual problems of fundamental and applied sciences (earch, technical and chemical), 15-16 October 2014, Baku, Azerbaijan; International Conference Condensed Matter Research at the IBR-2, 11-15 October 2015, Dubna, Russia; International Workshop on Nanoscience and Nanotechnology Joint 4<sup>th</sup> Asia-Pacific Chemical and Biological Microfluidics Conference, 2-4 November 2015, Da nang, Vietnam; High Pressure Science and Technology, 54th EHPRG Meeting, 4-9 September 2016, Bayreuth, Germany; The Third International Conference On Advanced Materials And Nanotechnology (ICAMN 2016), 2-5 October, 2016, Hanoi, Vietnam; Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universitetinin Fizika və texnologiya fakültəsinin elmi seminarı, 3 mart 2017-ci il, Bakı, Azərbaycan; International Conference Condensed Matter Research at the IBR-2, 9-12 October 2017, Dubna, Russia; “LI Зимняя школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния”, ПИЯФ, 11-16 марта 2017, Гатчина, Россия; IV Международная конференция «Многомасштабное моделирование структур, Строение вещества, Наноматериалы и нанотехнологии», 18-21 сентября 2017 г. Тула, Россия; XVIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества, 16-23 ноября 2017 Екатеринбург, Россия; Конференция «Молодежь в науке - 2.0'17», 30 октября – 2 ноября 2017 г. Минск, Беларусь; “52-ая Зимняя школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния”, ПИЯФ, 12-17 марта 2018, Санкт-Петербург, Россия; Ümummilli lider Heydər Əliyevin anadan olmasının 95-ci ildönümünə həsr olunmuş Gənc Tədqiqatçıların II Beynəlxalq Elmi Konfransı, 27-28 Aprel 2018-ci il, Bakı, Azərbaycan; “Modern trends in condensed matter physics, MTCMP-2018”Akademik H.V. Abdullayevin 100 illiyinə həsr olunmuş beynəlxalq konfrans və məktəb, 24-26 Sentyabr 2018-ci il, Bakı, Azərbaycan; Конференция

«Молодежь в науке - 2018», 29 октября – 1 ноября 2018 г. Минск, Беларусь; “ЛШ Школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния”, ПИЯФ, 11-16 марта 2019, Санкт-Петербург, Россия.

Dissertasiyanın əsas materialları 50 elmi işdə dərc edilmişdir ki, onlardan 27-i məqalə (o cümlədən 17-i impakt faktorlu xarici jurnal) və 23-ü konfrans materialıdır. Alınmış nəticələr Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutunun elmi-tədqiqatlarının hesabatlarında dərc olunmuşdur.

**Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilatın adı:**

Dissertasiya işi Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası akademik H.B. Abdullayev adına Fizika İnstitutunun “Qeyri-standart nəzarət və diaqnostika” laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

**Dissertasiyanın həcmi, quruluşu və əsas məzmunu:**

Dissertasiya işi girişdən, 7 fəsildən, nəticələrdən və 278 adda istifadə olunmuş ədəbiyyat siyahısından ibarətdir. İşin həcmi 81 şəkildən, 50 cədvəldən və ümumilikdə 416267 işarədən ibarətdir.

## İŞİN MƏZMUNU

**Girişdə** dissertasiya işinin mövzusunun aktuallığı, dissertasiya işinin əsas məqsədi, elmi yeniliklər, elmi və praktiki əhəmiyyəti, qarşıya qoyulmuş məqsəd və müdafiəyə çıxarılan müddəalar əsaslandırılmışdır.

Dissertasiya işinin **birinci fəsl**i, tədqiqat obyektləri olan perovskit və heksaqonal quruluşa malik olan birləşmələrdə aparılmış geniş tədqiqatların ədəbiyyat icmalına həsr edilmişdir. Perovskit quruluşa malik olan  $BaTiO_3$  klassik seqnetoelektrikinə kristal quruluşu, aşağı və yüksək temperaturalarda, həmçinin yüksək təzyiqlərdə baş verən quruluş faza keçidləri araşdırılmış, hər bir fazanın quruluş parametrləri təqdim edilmişdir. Klassik seqnetoelektriklərdə diamagnet atomların magnet ionları ilə qismən əvəzləmələri zamanı uzaq magnet nizamlılığının yaranma mexanizmləri təhlil edilmişdir. Barium titanatda Ti atomlarının

maqnit xassələrinə malik olan Mn və Fe atomları ilə əvəzləməri zamanı baş verən quruluş çevrilmələri öyrənilmişdir.

Klassik seqnetoelektrlərdən fərqli olaraq bir sıra perovskitlər vardır ki, onlar spontan polyarlaşma ilə yanaşı, eyni zamanda, maqnit xassələrə də malik olurlar. Belə xassələrə malik olan multiferroiklər haqqında geniş məlumat verilmişdir. Maqnitlərdə, kobaltlərdə və ferritlərdə baş verən maqnit xassələri: antiferromaqnetizm və ferrimaqnetizm hadisələri geniş təhlil edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, materiallarda seqnetoelektrik xassələrin güclənməsi, atomların öz ideal mövqelərindən müəyyən qədər sürüşmələri nəticəsində baş verir. Bu zaman birləşmələrdə uzaq maqnit nizamlılığının pozulması baş verir. Uzaq maqnit nizamlılığının yaranması zamanı isə maqnit ionlarının müəyyən simmetriya oxu istiqamətində nizamlı düzülüşü yaranır və bu zaman kristal quruluşu təşkil edən atomlar öz ideal vəziyyətlərinə qayıtmış olurlar ki, o halda spontan polyarlaşmanın qiymətində azalma baş verir. Eyni zamanda seqnetoelektrik və maqnit xassələrə malik olan perovskitlərin quruluş aspektləri açıqlanmışdır. Əvvəlki tədqiqatlar zamanı  $AMnO_3$ <sup>1</sup>,  $ACoO_3$ <sup>2</sup> və  $AFeO_3$ <sup>3</sup> birləşmələrinin quruluş və maqnit xassələri haqqında alınmış nəticələr geniş şərh edilmişdir.

Barium heksaferrit və onun əsasında sintez edilmiş birləşmələrin quruluş və maqnit xassələri araşdırılmışdır.  $BaFe_{12}O_{19}$  birləşmələrində Fe atomlarının diamaqnit metal atomları ilə qismən əvəzləmələri zamanı alınmış birləşmələrin kristal quruluşlarının, birləşmələrə daxil olan diamaqnit metal atomlarının ion radiuslarından fərqi araşdırılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki,

---

<sup>1</sup> Kozlenko, D.P. Antipolar phase in multiferroic  $BiMnO_3$  at high pressure / D.P.Kozlenko, A.A.Belik, A.V. Belushkin [et al.] // Phys. Rev. B, -2011. v.84, -p.094108.

<sup>2</sup> Rutkauskas, A.V. Suppression of the antiferromagnetic state in  $La_{0.82}Ba_{0.18}CoO_3$  cobaltite at high pressure / A.V.Rutkauskas, D.P. kozlenko, I.O.Troyanchuk [et al.] // JETP letters, -2015. v.101, -p.820-824.

<sup>3</sup> Kozlenko, D.P. Antipolar phase in multiferroic  $BiFeO_3$  at high pressure / D.P.Kozlenko, A.A.Belik, A.V.Belushkin [et al.] // Phys. Rev. B, -2011. v.84, -p.094108.

BaFe<sub>12-x</sub>Me<sub>x</sub>O<sub>19</sub> birləşmələrinin quruluş və maqnit xassələri, həmçinin atom dinamikaları, məhlullara daxil edilən metal atomlarının ion radiuslarından və bu atomların  $x$  konsentrasiyasından kəskin asılıdır. Barium heksaferritdə olduğu kimi onun əsasında sintez edilmiş birləşmələrdə də dayanıqlı kristal quruluşu müşahidə edilmişdir. Yüksək təzyiğin təsiri ilə qəfəs parametrlərinin dəyişmə mexanizmi müəyyən edilmişdir.

**İkinci fəsil** dissertasiya işinin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə edilmiş təcrübi və nəticələrin analizində istifadə edilən metodlara və cihazlara həsr edilmişdir. Bütün tədqiqatlar son nəsil müasir cihaz və qurğularda yerinə yetirilmişdir.

Perovskit və heksaferrit birləşmələrinin ovuntu halında olan nümunələri sintez edilmiş, nümunələrin kristal quruluşları otaq temperaturunda və normal şəraitdə rentgen difraksiyası metodu ilə 40 kV, 40 mA, CuK<sub>α</sub> - şüalanma ( $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$ ) parametrlərinə malik olan D8 Advance (Bruker) – toz difraktometrində tədqiq edilmişdir.

Sinxrotron şüalandırma metodu ilə rentgen difraksiyası eksperimentləri, PETRA-III mənbəyinin P02.2 kanalında (DESY, Hamburg, Almaniya) yerinə yetirilmişdir. PETRA-III mənbəyində aparılan tədqiqatlar zamanı yüksək təzyiqlərin alınması üçün  $d = 250$  mkm-lik almaz zindanlardan istifadə edilmişdir. Almaz zindanların arasında nümunələrin yerləşdirilməsi üçün Re qasketdən istifadə edilmişdir. Qasketin  $h = 125-130$  mkm-lik hissəsində  $h = 30-40$  mkm-lik nümunə yerləşdirilmişdir. Təzyiğin qiymətini təyin etmək üçün nümunənin yanında  $d = 10-15$  mkm-lik yaqut kristalı yerləşdirilmişdir. Təzyiğin qiyməti yaqutun lüminesensiya xətlərinə nəzərən  $\Delta P = 0.005$  GPa dəqiqliyi ilə təyin edilmişdir. Almaz zindanlardan ibarət olan təzyiç kameralarında hidrostatikanı təmin etmək və təzyiç qradientini minimuma endirmək üçün, əsasən iki metoddan istifadə edilmişdir. Əgər təcrübələr  $P = 10$  GPa-a qədər yüksək təzyiqlərdə aparılırsa, o zaman 4:1 nisbətində olan metanol etanol qarışığından istifadə edilmişdir.  $P = 10$  GPa-dan yüksək təzyiqlərdə isə təsirsiz He və ya Ne qazlarından istifadə edilmişdir.

Enerji dispersiyalı rentgen difraksiyası metodu ilə quruluş tədqiqatları DORIS-III mənbəyinin F2.1 kanalında quraşdırılmış



MAX80 yüksək təzyiqliq hidravlik presində (DESY, Hamburg, Almaniya) yerinə yetirilmişdir. MAX80 qurğusunda yüksək təzyiqlər almaq üçün WC (volfram karbid) zindanlardan istifadə edilmişdir. Təzyiqliq qradientini minimuma endirmək üçün, 6 tərəfli sıxılmadan istifadə edilmişdir. Yüksək temperaturların alınması üçün xüsusi kameraya yerləşdirilmiş qrafit sobadan istifadə edilmişdir. MAX80 qurğusunda, eyni zamanda,  $P = 0-10$  GPa təzyiqliq və  $T = 300-1200$  K temperatur intervallarında tədqiqat aparmaqliq imkanı vardır.

Yüksək təzyiqlərdə neytron difraksiyası eksperimentləri “ИБР-2” impuls reaktorunun 12-ci kanalında yerləşən DN-12 neytron difraktometrində və 6-cı kanalında yerləşən DN-6 neytron difraktometrində (LNF, BNTİ, Dubna, Rusiya) aparılmışdır. DN-12 neytron difraktometri, yüksək təzyiqlərdə tədqiqatlar aparmaqliq imkan verir. Yüksək təzyiqliqin alınması üçün safir zindanlardan ibarət olan yüksək təzyiqliq kamerasından istifadə edilir ki, bu zindanların köməqliyi ilə 10 GPa-a qədər təzyiqliq almaqliq mümkündür. Neytron seli zindanlararası məsafədən (bu məsafə təzyiqliqin qiymətinə görə dəyişir) nümunənin üzərinə düşür. Təzyiqliq, həcm və temperaturun qiymətləri alınmış difraksiya xətlərindəki dəyişikliklərə görə təyin olunur. Nümunə neytron seli vasitəsilə şüalandırılır, nümunədən səpilən neytronlar He əsaslı qaz detektoru vasitəsi ilə qeyd olunur. Detektorun Breq bucaqliqı  $90^\circ$ -dir. Spektrlər 12 saat ərzində qeydə alınır. Tədqiq olunan nümunələrin həcmi  $V \sim 2.5$  mm<sup>3</sup>-dir. Təzyiqliq qradienti təxminən 10 %-dir. Aşaqliq temperaturlarda kristalın quruluşlarını və maqnit xassələrini tədqiq etmək üçün helium soyutma sistemindən istifadə edilir. Bu sistemin köməqliyi ilə tədqiqat nümunələrində 10 K-ə qədər aşağı temperaturları almaqliq mümkündür. Soyutma sistemi elə hazırlanmışdır ki, daxilində yüksək təzyiqliq kamerası da yerləşdirmək mümkündür. Ona görə də eyni zamanda yüksək təzyiqlərdə və aşağı temperaturlarda tədqiqatlar aparmaqliq imkan verir. DN-6 neytron difraktometri də DN-12 difraktometrinin bazasında yaradılmışdır. Bu difraktometrde safir zindanlarla yanaqliq, həm də almaz zindanlarla da tədqiqatlar aparmaqliq mümkündür.

Raman spektrləri, LabRam spektrometrində (632 nm dalğa uzunluqlu NeHe lazeri) ölçülmüşdür. Raman tədqiqatları zamanı yüksək təzyiqlərin alınması üçün PETRA-III mənbəyinin P02.2 kanalında sinxrotron şüalandırma metodu ilə rentgen difraksiyası eksperimentləri zamanı istifadə edilmiş almaz zindanlardan ibarət təzyiç kamerasından istifadə edilmişdir.

Alınmış rentgen və neytron difraksiyası spektrləri Ritveld metodu ilə analiz edilmişdir. Kristal quruluşlar “FullProf”, “MRIA”, “VMRIA” və “Fit2D” proqramları vasitəsilə, maqnit quruluşlar “FullProf” proqramı vasitəsilə öyrənilmişdir. Raman spektrlərinin analizi zamanı “Origin” proqramından, Qauss və Lorens funksiyalarından istifadə edilmişdir. Kristal quruluşlarda atomlararası rabitələrin uzunluqlarının və rabitələr arasındakı bucaqların hesablanması zamanı “Diamond 3.2” proqramından istifadə edilmişdir.

**Üçüncü fəsil**də  $\text{BaTiO}_3$  klassik seqnetoelektriki əsasında alınmış multiferroiklərin kristal və maqnit xassələrinin tədqiqi aparılmışdır. Ovuntu halında olan  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  birləşmələrinin quruluş tədqiqatları zamanı müəyyən edilmişdir ki, otaq temperaturunda Mn atomlarının  $x \leq 0.01$  konsentrasiya intervalında birləşmələrinin kristal quruluşları P4mm tetraqonal kristal quruluşa uyğun gəlir. Otaq temperaturunda  $\text{BaTi}_{0.99}\text{Mn}_{0.01}\text{O}_3$  birləşməsinin qəfəs parametrləri, atom koordinatları və atomlararası məsafələri Cədvəl 1-də göstərilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki,  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  birləşmələrində Mn atomlarının konsentrasiyası artıb  $x = 0.04$  olduqda, yeni kristal quruluş formalaşır və  $P6_3/mmc$  fəza qruplu heksaqonal kristal quruluş yaranır. Mn atomlarının konsentrasiyasının sonrakı artımı zamanı heksaqonal simmetriyaya uyğun gələn difraksiya piklərinin intensivliklərinin tetraqonal simmetriyaya uyğun gələn difraksiya piklərinin intensivliklərinə nəzərən artması müşahidə edilmişdir.  $x = 0.09$  olduqda tetraqonal faza tamamilə yox olmuş və  $0.09 \leq x \leq 0.12$  konsentrasiya intervalında  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  birləşmələri üçün heksaqonal faza alınmışdır. Faza faizlərinin Mn atomlarının  $x$  konsentrasiyasından asılılıqları təyin edilmişdir.

**Cədvəl 1. Otaq temperaturunda BaTi<sub>0.99</sub>Mn<sub>0.01</sub>O<sub>3</sub> birləşməsinin qəfəs parametrləri, atom koordinatları və atomlararası məsafələri.**

Fəza qrupu <b>P4mm</b> , $a = b = 3.9930(4) \text{ \AA}$ , $c = 4.0209(5) \text{ \AA}$			
<b>Atom</b>	<b><i>x</i></b>	<b><i>y</i></b>	<b><i>z</i></b>
Ba	0	0	0
M (Ti/Mn)	0.5	0.5	0.4823(2)
O1	0.5	0.5	0.0185(3)
O2	0.5	0	0.5221(3)
<b>Atomlararası məsafələr</b>			
M-O1 2.177(2) Å×1			
M-O1 1.856(2) Å×1			
M-O2 2.000(2) Å×4			

Otaq temperaturunda BaTi<sub>0.99</sub>Mn<sub>0.01</sub>O<sub>3</sub> birləşməsinin 6H tip heksaqonal fazada qəfəs parametrləri, atom koordinatları və atomlararası məsafələri cədvəl 2-də göstərilmişdir. 6H tip heksaqonal kristal quruluş *c* oxu boyunca düzülmiş M<sub>2</sub>O<sub>9</sub> oktaedrlərin dimerlərinin, kristal qəfəsin küncələrində dayanan MO<sub>6</sub> oktaedrləri ilə əlaqələrindən ibarətdir. Bu quruluşda oktaedrlərlə əhatə olunmuş M1 və M2 iki asılı olmayan kristalloqrafik keçid metalı mövcuddur. M2 metal atomları dimerlərin daxilində yerləşirlər, M1 metal atomları isə, kristal qəfəsin düyünlərində dayanan oktaedrlərin daxilində yerləşirlər. Dimerlərin daxilində yerləşən M2 metal atomları arasındakı məsafələr 2.552(4) Å-ə yaxındır. Dimerlərin daxilində metal ionlarının elektrostatik dəfətməsinin azalması nəticəsində M2 ionları oksigen oktaedrlərinin mərkəzlərindən sürüşmüş vəziyyətdə olurlar ki, bu da dimerlərdə oktaedrlərin təhrif olunmasına və M-O rabitələrindən üçünün digər üçünə nəzərən kiçik olmasına gətirib çıxarır. BaTi<sub>0.99</sub>Mn<sub>0.01</sub>O<sub>3</sub> birləşməsində, M1-M2, O2-O1 və M2-O2 atomları arasındakı məsafələri 1.996(1) Å, 1.956(2) Å və 1.970(1) Å qiymətlərinə uyğun gəlirlər. Bunu qeyd etmək lazımdır ki, tetraqonal fazaya nisbətən 6H tip heksaqonal fazada oktaedr simmetriyasının

təhrif olunması azdır.  $\text{BaTi}_{0.99}\text{Mn}_{0.01}\text{O}_3$  birləşməsində tetraqonal fazada M-O rabitələrinin uzunluqlarının təhrif olunmasının orta qiyməti 0.058 Å olduğu halda,  $\text{BaTi}_{0.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_3$  birləşməsində 6H tip heksaqonal fazada M-O rabitələrinin uzunluqlarının təhrif olunmalarının orta qiyməti təxminən dörd dəfə kiçik olur və  $\Delta l \approx 0.015$  Å qiymətini alır.

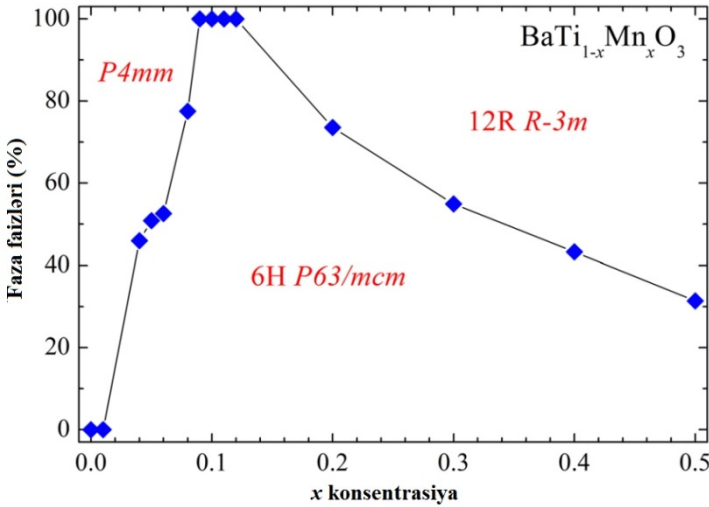
**Cədvəl 2. Otaq temperaturunda  $\text{BaTi}_{0.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_3$  birləşməsinin 6H tip heksaqonal fazada qəfəs parametrləri, atom koordinatları və atomlararası məsafələri.**

Fəza qrupu $\text{P6}_3/\text{mmc}$ , $a = b = 5.7062(4)$ Å , $c = 13.9297(5)$ Å			
Atom	$x$	$y$	$z$
Ba1	0	0	0.25
Ba2	1/3	2/3	0.0988(2)
M1 (Ti/Mn)	0	0	0
M2 (Ti/Mn)	1/3	2/3	0.8416(2)
O1	0.5166(2)	-0.5166(2)	0.25
O2	0.8320(3)	-0.8320(3)	0.0795(3)
Atomlararası məsafələr			
	M1-O2 1.996(2) Å×6		
	M2-O1 1.957(2) Å×2		
	M2-O2 1.970(2) Å×4		
	M1-M2 3.965(1) Å×1		
	M2-M2 2.552(1) Å×1		

Mn atomlarının  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  seqnetoelektriklərinin Kuri temperaturuna necə təsir etməsini öyrənmək üçün, temperaturun təsiri ilə  $\text{BaTi}_{0.99}\text{Mn}_{0.01}\text{O}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu neytron difraksiyası ilə tədqiq edilmişdir.  $T_K = 400$  K Kuri temperaturunda qəfəs parametrlərinin temperatur asılılığında anomaliya müşahidə edilmişdir. Bu anomaliya,  $\text{P4mm}$  fəza qruplu seqnetoelektrik xassələrə malik olan tetraqonal fazadan  $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$  fəza qruplu paraelektrik xassələrə malik olan kubik fazaya quruluş fəza keçidinə uyğun gəlir. Aydın olmuşdur ki, Ti atomlarının Mn atomlarının əlavə

edilməsi nəticəsində Kuri temperaturunun qiymətinin  $\text{BaTiO}_3$  ( $T_K = 403 \text{ K}$ ) ilə müqayisədə bir qədər azalır.

$\text{BaTi}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  ( $0.12 \leq x \leq 0.5$ ) birləşmələrinin neytron difraksiya tədqiqatlarından alınmışdır ki, birləşmələrdə  $x \geq 0.2$  olduqda yeni fazanın əmələ gəlməsi başlayır. Yeni faza R-3m fəza qruplu romboedrik kristal quruluşa uyğun gəlmişdir. Mn atomlarının konsentrasiyası artdıqca, difraksiya mənzərəsində romboedrik fazaya uyğun difraksiya piklərinin intensivlikləri heksaqonal fazaya uyğun difraksiya piklərinin intensivliklərinə nəzərən artmışdır ki, bu da romboedrik fazanın yaranması nəticəsində baş vermişdir. Mn atomlarının konsentrasiyasının  $x = 0.5$  qiymətinə qədər bu fazaların mövcudluğu müşahidə edilmişdir.  $\text{BaTi}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}_3$  birləşməsində heksaqonal və romboedrik fazaların faizlə həcm nisbətləri 31:69 olmuşdur (Şəkil 1).



**Şəkil 1.  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  birləşmələri üçün faza faizlərinin Mn atomlarının konsentrasiyasından asılılıqları.**

Neytron difraksiyası tədqiqatları göstərmişdir ki,  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  kristallarında  $0 \leq x \leq 0.5$  şərtləri daxilində maqnit xassələri formaləşə bilmir. Bu birləşmələrdə maqnit xassələrin də

formalaşmasını müşahidə etmək üçün,  $\text{BaMnO}_3$  antiferromaqnitində Mn ionlarının qismən Ti atomları ilə əvəzləmələri aparılmışdır. Ovuntu halında olan  $\text{BaMn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$  ( $0 \leq x \leq 0.25$ ) birləşmələrinin kristal quruluşları otaq temperaturunda rentgen difraksiya metodu ilə tədqiq edilmişdir.  $\text{BaMnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu R-3m fəza qruplu romboedrik kristal quruluşa uyğun gəlir.  $\text{BaMnO}_3$  polikristallarında Mn atomlarının Ti atomları ilə qismən əvəzləmələri ilə alınmış  $\text{BaMn}_{0.95}\text{Ti}_{0.05}\text{O}_3$  birləşməsinin rentgen difraksiyası spektrlərində yeni maksimumların əmələ gəlməsi müşahidə edilmişdir. Alınmış nəticələrin analizi göstərmişdir ki, bu maksimumlar  $P6_3/mmc$  fəza qruplu heksaqonal simmetriyaya uyğun gəlir.  $\text{BaMn}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{O}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu da romboedrik və heksaqonal fazalardan ibarət olmuşdur. Bu romboedrik faza Ti atomlarının konsentrasiyasının  $x = 0.25$  qiymətinə qədər müşahidə edilmişdir.

$\text{BaMn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$  ( $0 \leq x \leq 0.25$ ) birləşmələrində uzaq maqnit nizamlılığını öyrənmək üçün,  $T = 10$  K-ə qədər aşağı temperatur oblastında neytron difraksiya tədqiqatları aparılmışdır. Aşağı temperaturlar oblastında bütün nümunələrdə maqnit təbiətli yeni maksimumlar müşahidə edilmişdir. Spektrlərin Ritveld metodu ilə analizi göstərmişdir ki, birləşmələrdəki maqnit xassələri, antiferromaqnit nizamlılığına uyğun gəlir. Heksaqonal və romboedrik fazalar üçün maqnit quruluşları təyin edilmişdir.

**Dördüncü fəsil**də  $\text{BaTiO}_3$  klassik seqnetoelektriki əsasında alınmış multiferroiklərin kristal və maqnit xassələrinin tədqiqi aparılmışdır. Ovuntu halında olan  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$  ( $0 \leq x \leq 0.1$ ) polikristalları sintez edilmiş, onların kristal quruluşları otaq temperaturunda neytron difraksiyası metodu ilə tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki,  $\text{BaTiO}_3$  normal şəraitdə,  $P4mm$  fəza qruplu tetraqonal simmetriyaya malikdir. Konsentrasiyanın  $x = 0.08, 0.09, 0.1$  olduğu halda sintez edilmiş birləşmələrin kristal quruluşları  $P6_3/mmc$  fəza qruplu heksaqonal simmetriyaya uyğun gəlmişdir. Alınmış birləşmələrin kristal quruluşlarındakı dəyişikliklər Ti və Fe atomlarının ion radiuslarındakı fərqlə izah edilmişdir. Spektrlərin analizi göstərmişdir ki,  $\text{BaTi}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}\text{O}_3$  birləşməsinin kristal

quruluşu  $P6_3/mmc$  fəza qruplu heksaqonal simmetriyaya uyğun gəlir.  $BaTi_{0.91}Fe_{0.09}O_3$  və  $BaTi_{0.9}Fe_{0.1}O_3$  birləşmələrinin də kristal quruluşları  $P6_3/mmc$  fəza qruplu heksaqonal simmetriyaya uyğun gəlir. Heksaqonal fazada  $BaTi_{1-x}Fe_xO_3$  birləşmələrin kristal quruluşlarında: Ba1 – (2b) (0, 0, 0.25); Ba2 – (4f) (1/3, 2/3, z); Ti/Fe1 – (2a) (0, 0, 0); Ti/Fe2 – (4f) (1/3, 2/3, z); O1 - (6h) (x, -x, 0.25) и O2 - (12k) (x, -x, z) mövqelərində yerləşirlər. Bu birləşmələr üçün alınmış qəfəs parametrlərinin qiymətləri və atom koordinatları cədvəl 3-də verilmişdir.

Fe atomlarının  $x$  konsentrasiyasının artması ilə alınmış birləşmələrin kristal quruluşlarında baş verən əsaslı dəyişikliklər titan və dəmir atomlarının ion radiuslarının arasındakı fərqlə əlaqədardır: Fe atomlarının ion radiusu  $R_{Fe} = 0.54 \text{ \AA}$  və Ti atomlarının ion radiusu  $R_{Ti} = 0.65 \text{ \AA}$  biri-birindən kifayət qədər fərqlənirlər. Bildiyimiz kimi, ion radiusların fərqlənməsi, kristal quruluşu əmələ gətirən atomlar arası rabitələrin uzunluqlarına birbaşa təsir göstərir. Ona görə  $BaTi_{1-x}Fe_xO_3$  kristallarında Fe atomlarının konsentrasiyası artdıqca, birləşmələr daha yüksək simmetriyalı quruluş fazasında formalaşırlar.

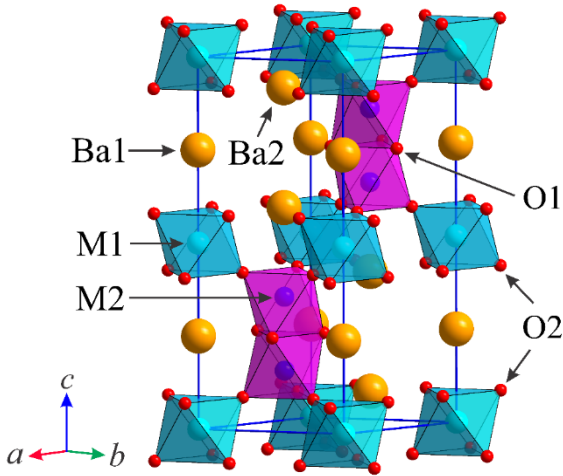
**Cədvəl 3.  $BaTi_{1-x}Fe_xO_3$  ( $x = 0.08, 0.09$  və  $0.1$ ) birləşmələrinin  $P6_3/mmc$  heksaqonal fazasında qəfəs parametrləri və atom koordinatları.**

$x$	0.08	0.09	0.10
$a$ (Å)	5.714(4)	5.713(3)	5.713(3)
$c$ (Å)	13.940(3)	13.947(2)	13.929(3)
<b>Ba2:</b> $z$	0.097(3)	0.093(4)	0.093(3)
<b>Ti/Fe2:</b> $z$	0.843(4)	0.847(2)	0.846(2)
<b>O1:</b> $x$	0.513(4)	0.513(4)	0.510(3)
<b>O2:</b> $x$	0.831(2)	0.831(3)	0.831(3)
$z$	0.080(4)	0.081(4)	0.081(4)

$BaTi_{1-x}Fe_xO_3$  birləşmələrinin neytron difraksiyası tədqiqatları göstərmişdir ki, bu birləşmələrdə Fe atomlarının konsentrasiyasının qiymətinin  $x = 0-0.1$  intervalında maqnit xassələri müşahidə edilmir.

Ti atomları qismən Fe atomları ilə əvəz edildikcə, metal atomları Ti(Fe)O<sub>6</sub> oktaedrlərinin mərkəzinə doğru yerdəyişmə edirlər. Bunun nəticəsində bu birləşmələrdə Fe atomlarının konsentrasiyası artdıqca, seqnetoelektrik xassələri azalmağa başlayır.

BaTi<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>O<sub>3</sub> ( $x = 0.08, 0.09, 0.1$ ) birləşmələrində maqnit xassələrinin müşahidə edilmədiyini üçün, bu tip birləşmələrdə uzaq maqnit nizamlılığının əmələgəlmə mexanizminin müşahidə edilməsi üçün BaFe<sub>1-x</sub>Ti<sub>x</sub>O<sub>3</sub> ( $x = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ ) birləşmələri sintez edilmiş, onların quruluş və maqnit xassələri tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmələr P6<sub>3</sub>/mmc fəza qruplu heksaqonal simmetriyalı kristal quruluşa malik olurlar. Normal şəraitdə və otaq temperaturunda alınmış kristal quruluş şəkil 2-də göstərilmişdir.



**Şəkil 2. Normal şəraitdə və otaq temperaturunda BaFe<sub>1-x</sub>Ti<sub>x</sub>O<sub>3</sub> ( $0.05 \geq x \geq 0.2$ ) birləşmələrinin kristal quruluşu.**

Birləşmələrin tərkibində Ti atomlarının konsentrasiyası artdıqca qəfəs parametrlərinin, atomlararası rabitələrin uzunluqlarında və rabitələrarası bucaqların qiymətlərində müxtəlif dəyişikliklər müşahidə edilmişdir ki, bunlar da tetraqonal kristal quruluşa yaxınlaşmalara uyğun gəlir, aşağı temperatur oblastında



ferromaqnit xassələrə malik olurlar. Uzaq maqnit nizamlılığının yaranmasının quruluş aspektlərinin tədqiqi göstərmişdir ki, elementar qəfəsdə oksigen atomlarının əmələ gətirdikləri oktaedrlər birləşərək dimerlər əmələ gətirir və bu dimerlərin mərkəzlərində yerləşən Fe atomları uzaq maqnit nizamlılığını əmələ gətirir. Ti atomlarının  $0.05 \geq x \geq 0.2$  konsentrasiyası intervalında  $\text{BaFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$  birləşmələrinin Küri temperaturunun qiyməti  $T_K = 133 \text{ K}$ -dən  $70 \text{ K}$ -ə qədər azalır. Ti atomlarının konsentrasiyasından asılı olaraq maqnit xassələrinin zəifləməsi yalnız Küri temperaturunun azalmasında deyil, həm də müxtəlif kristalloqrafik mövqələrdə yerləşən Fe atomlarının maqnit momentlərinin qiymətlərində də müşahidə edilmişdir.

Otaq temperaturunda yüksək təzyiğin təsiri ilə  $\text{BaTi}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu və atom dinamikası neytron difraksiyası, rentgen difraksiyası və Raman spektroskopiyası metodları ilə kompleks şəkildə tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki,  $P \approx 19 \text{ GPa}$  təzyiqdə tetraqonal quruluşdan kubik quruluşa seqnetoelektrik-paraelektrik faza keçidi baş verir. Hər bir faza üçün qəfəs parametrlərinin dəyişmə mexanizmləri müəyyənləşdirilmişdir. Tetraqonal və kubik fazalar üçün elementar qəfəsin parametrlərinin təzyiq asılılıqları alınmış, Berç-Murnaqaq tənliyi həll edilmişdir. Hərtərəfli sıxılma modulları və xətti sıxılma əmsalları müəyyən edilmişdir. Təcrübədən alınmış nəticələrə görə tetraqonal faza:  $B_0 = 121(3) \text{ GPa}$  və  $B' = 4.0(5)$  qiymətlərinə, kubik faza:  $B_0 = 147(8) \text{ GPa}$  və  $B' = 4.0(5)$  qiymətlərinə uyğundur.

Rentgen difraksiyası tədqiqatları Raman spektroskopiyası metodu ilə aparılmış təcrübələrlə təsdiq edilmişdir.  $P = 0\text{-}36.49 \text{ GPa}$  təzyiq intervalında alınmış Raman spektrlərinin analizi göstərmişdir ki, təzyiğin  $P \approx 19 \text{ GPa}$  qiymətində rəqs modallarında ciddi dəyişikliklər müşahidə edilir.

**Beşinci fəsildə** geniş temperatur və təzyiq intervalında müxtəlif quruluş və maqnit xassələrinə malik olan, perovskitə bənzər manganitlərdə təzyiq və temperaturun təsiri ilə müxtəlif metodlarla faza keçidləri və bu fazaların quruluş xassələri tədqiq edilmişdir.

Enerji dispersiyalı rentgen difraksiyası metodu ilə  $\text{BiMnO}_3$  multiferroikinin kristal quruluşu tədqiq edilmişdir. Eyni zamanda,

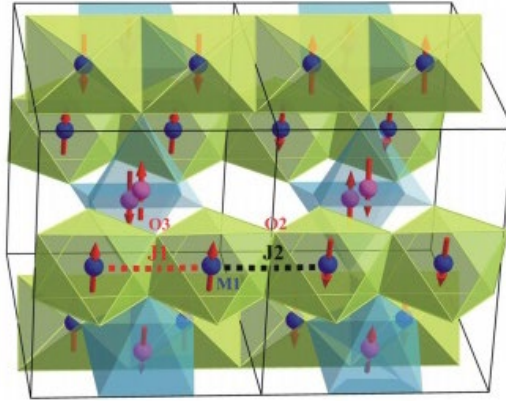
yüksək təzyiqlərdə ( $P = 0-4$  GPa) və yüksək temperaturlarda ( $T = 300-900$  K) aparılmış quruluş tədqiqatları nəticəsində P-T faza diaqramı qurulmuşdur. Yüksək temperaturlarda aparılmış təcrübələrdən alınmışdır ki,  $T \approx 773$  K temperaturda C2/c fəza qruplu monoklin simmetriyalı fazadan, daha yüksək simmetriyaya malik olan Pnma fəza qruplu ortorombik fazaya quruluş çevrilməsi baş verir. Eyni zamanda təzyiq və temperaturun təsiri ilə BiMnO<sub>3</sub> multiferroikinə kristal quruluşunda monoklin-ortorombik faza keçidi temperaturunun qiymətinin azalması ilə yanaşı, həm də bu quruluşların hər birinin mövcud olduğu fazalardan ibarət aralıq faza formalaşır.  $P < 1.6$  GPa təzyiqlərdə yüksək temperaturlar oblastında əvvəlcə C2/c fəza qruplu monoklin faza (M1), sonra C2/c fəza qruplu II monoklin faza (M2) sonda isə Pnma fəza qruplu ortorombik faza (O) müşahidə edilmişdir. Normal şəraitdə ( $P = 0$  GPa təzyiqdə) faza keçidi temperaturları üçün  $T_{M1-M2} = 490$  K və  $T_{M2-O} = 773$  K qiymətləri alınmışdır. Təzyiqin qiyməti artdıqca, aralıq fazanın eni də artır. Monoklin simmetriya daxilində quruluş çevrilməsi baş verdiyi zaman  $a$  qəfəs parametrinin qiyməti kəskin artmış,  $b$  və  $c$  qəfəs parametrlərinin qiymətləri azalmışdır ki, bunun nəticəsində də elementar qəfəsin həcmi 0.2% azalmışdır.

Berç-Murnagan tənliyi həll edilmiş və hərtərəfli sıxılma modulları müəyyən edilmişdir. Təcrübədən alınmış nəticələrə görə BiMnO<sub>3</sub> birləşməsi üçün:  $B_0 = 125(5)$  GPa və  $B' = 4(1)$  qiymətlərinə uyğundur.

Daha geniş təzyiq intervalında BiMnO<sub>3</sub> birləşməsinin kristal quruluşunu öyrənmək məqsədi ilə rentgen difraksiyası tədqiqatları aparılmışdır.  $P = 20$  GPa təzyiqdə yeni quruluş faza keçidi baş vermişdir. Tədqiqatlar zamanı alınmış spektrlər Ritveld metodu ilə analiz edildiyi zaman müəyyən edilmişdir ki, BiMnO<sub>3</sub> kristallarında alınmış yeni quruluş fazası Imma fəza qruplu ortorombik kristal quruluşa uyğun gəlir. Ortorombik Pnma və Imma fazaları üçün:  $a_p\sqrt{2} \times 2a_p \times a_p\sqrt{2}$  kubikə bənzər perovskit modelindən istifadə edilmişdir. Bu quruluşlar arasındakı əsas fərq onları əmələ gətirən MnO<sub>6</sub> oktaedrlərinin müxtəlif bucaq altında yerləşmələridir. Pnma quruluş fazasında MnO<sub>6</sub> oktaedrləri (010) və (101) oxları ətrafında

müəyyən bucaq qədər döndükləri halda, Imma quruluş fazasında  $MnO_6$  oktaedrləri yalnız (010) oxu ətrafında müəyyən bucaq qədər dönür. Müəyyən edilmişdir ki, Pnma fazasında Yan-Teller təhrif olunması baş verdiyi halda, Imma fazasında baş vermir.

$P = 0-5.7$  GPa təzyiq və  $T = 10-60$  K temperatur diapazonunda ovuntu halında olan  $BiMn_2O_5$  ikiqat perovskit birləşməsinin polikristallarının quruluş və maqnit xassələri tədqiq edilmiş, Neel temperaturunun təzyiqdən asılılığı alınmış və P-T faza diaqramı qurulmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, normal şəraitdə aşağı temperaturlar oblastında bu birləşmə antiferromaqnit xassələrə malikdir və  $T_N \approx 41$  K temperaturda antiferromaqnit-paramaqnit faza keçidi baş verir. Yüksək təzyiqin təsiri ilə Neel temperaturunun qiymətində  $dT_N/dP = 3.04$  K/GPa əmsalı ilə artma müşahidə edilmişdir. Antiferromaqnit və paramaqnit fazalar üçün atom koordinatları təyin edilmiş, atomlararası məsafələr və rabitələrarası bucaqların qiymətləri müəyyənləşdirilmişdir. Kristal quruluş şəkil 3-də göstərilmişdir.



**Şəkil 3.  $BiMn_2O_5$  birləşməsinin kristal və maqnit quruluşu.**

Kristal qəfəsdə yerləşən Mn atomlarının maqnit momentləri təyin edilmiş, bu maqnit momentlərinin təzyiq və temperaturdan asılılıqları qurulmuşdur.  $Mn^{4+}O_6$  oktaedrlərindən və  $Mn^{3+}O_5$

bipiramidalarından ibarət olan kristal və maqnit quruluş qurulmuşdur.

$T = 10-60$  K temperatur intervalında alınmış neytron difraksiyası spektrlərinin analizi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, aşağı temperaturlar diapazonunda bu birləşmənin kristal quruluşu Pbam fəza qruplu ortorombik simmetriyaya uyğun gəlir.  $\text{BiMn}_2\text{O}_5$  birləşməsinin 60 K temperaturda alınmış qəfəs parametrləri və atom koordinatları, atomlararası məsafələr və rabitələrarası bucaqların qiymətləri cədvəl 4-də verilmişdir.

**Cədvəl 4.  $\text{BiMn}_2\text{O}_5$  birləşməsinin 60 K temperaturda alınmış qəfəs parametrləri, atom koordinatları, atomlararası məsafələr və rabitələr arası bucaqların qiymətləri.**

<b>Fəza qrupu:</b> Pbam, $a = 7.5574(8)$ Å, $b = 8.5543(9)$ Å, $c = 5.7704(7)$ Å					
<b>Atom</b>	<b>Mövqeyi</b>	<b>X</b>	<b>Y</b>	<b>z</b>	
Bi	4g	0.1624(5)	0.1669(5)	0	
Mn1	4f	0	0.5	0.2558(6)	
Mn2	4h	0.4097(8)	0.3501(9)	0.5	
O1	4e	0.5	0.5	0.2945(7)	
O2	4g	0.1586(9)	0.4410(7)	0	
O3	4h	0.1430(8)	0.4281(7)	0.5	
O4	8i	0.3873(7)	0.1992(6)	0.2498(9)	
<b>Mn-O (Å)</b>		<b>Mn-Mn (Å)</b>		<b>Mn-O-Mn (°)</b>	
Mn1-O2×2	1.967(5)	Mn1-Mn1	2.818(5)	Mn1-O2-Mn1	99.2(2)
Mn1-O3×2	1.879(5)	Mn1-Mn1	2.952(5)	Mn1-O3-Mn1	97.2(2)
Mn1-O4×2	1.905(5)	Mn2-Mn2	2.910(2)	Mn1-O3-Mn2	130.5(2)
Mn2-O1×1	1.875(6)			Mn1-O4-Mn2	122.8(2)
Mn2-O3×2	2.123(9)			Mn2-O1-Mn2	101.0(2)
Mn2-O4×2	1.944(8)				

Neytron difraksiyası, rentgen difraksiyası və Raman spektroskopiyası metodları ilə  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  birləşməsinin kristal quruluşu və atom dinamikası yüksək təzyiqlər oblastında kompleks şəkildə tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, normal şəraitdə  $\text{YMn}_2\text{O}_5$

birləşməsi Pbam fəza qruplu ortorombik simmetriyaya malikdir.  $P = 0-6.5$  GPa təzyiqlə və  $T = 10-290$  K temperatur intervalında P-T faza diaqramı qurulmuşdur. Faza diaqramından görünür ki, Neel temperaturunun təzyiqdən asılılığında anomaliya müşahidə olunmuşdur və azalma baş vermişdir. Aşkar edilmişdir ki, normal şəraitdə aşağı temperaturda oblastında  $YMn_2O_5$  birləşməsi antiferromaqnit xassələrinə malik olur  $T_N \approx 45$  K Neel temperaturunda antiferromaqnit-paramaqnit faza keçidi baş verir. Üçvalentli və dördvalentli Mn atomlarının maqnit momentləri təyin edilmiş, onların təzyiqlə və temperatur asılılıqları qurulmuşdur.

Rentgen difraksiyası tədqiqatlarının nəticələrindən alınmışdır ki,  $P \approx 16$  GPa təzyiqdə bu birləşmədə ortorombik faza daxilində qəfəs parametrlərinin dəyişmə mexanizmində anomaliya ilə müşahidə edilən faza keçidi baş verir. Bu faza keçidi, Raman spektroskopiyası ilə aparılmış tədqiqatlar zamanı rəqs modalarının dəyişmə mexanizmində də müşahidə edilmişdir.  $YMn_2O_5$  kristalları üçün Berç–Murnagan tənliyi həll edilmiş, təcrübədən alınmış nəticələrə görə:  $B_0 = 192(5)$  GPa və  $B' = 3.0(5)$  əmsallarının qiymətləri təyin edilmişdir.

Otaq temperaturunda və  $P \approx 0-30$  GPa geniş təzyiqlə intervalında heksaqonal kristal quruluşa malik olan  $YMnO_3$  və  $LuMnO_3$  perovskitə bənzər maqnitlərin ovuntu halında olan nümunələrinin kristal quruluşları rentgen difraksiyası metodu ilə tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, göstərilən təzyiqlə intervalında heç bir quruluş faza keçidi baş vermir və bu birləşmələr dayanıqlı kristal quruluşa malikdirlər.

Rentgen difraksiyası metodu ilə otaq temperaturunda və normal şəraitdə  $YMnO_3$  birləşməsi üçün alınmış atom koordinatları cədvəl 5-də verilmişdir. Otaq temperaturunda  $YMnO_3$  birləşməsinin elementar qəfəsinin həcmnin təzyiqdən asılılıqlarından görünmüşdür ki, təzyiqlə qiyməti artdıqca qəfəs parametrlərinin qiymətlərində  $k_l = (1/l_0)(dl/dP)_T$  qanunu ilə azalma baş verir.  $a$  və  $c$  qəfəs parametrlərinin dəyişməsi üçün:  $k_a = 0.0014(6)$  GPa<sup>-1</sup>,  $k_c = 0.0006(2)$  GPa<sup>-1</sup> qiymətləri müəyyən edilmişdir. Həcm azalması Berç–Murnagan tənliyi ilə öyrənilmiş  $YMnO_3$  birləşməsi üçün  $B_0 =$

$V(dP/dV)_T$  hərtərəfli sıxılma modulu və  $B' = (dB_0/dP)_T$  onun təzyiçə görə birinci tərtib törəməsinin qiymətləri müəyyən edilmişdir. Təcrübədən alınmış nəticələrə görə:  $B_0 = 214(7)$  GPa və  $B' = 4(1)$  qiymətlərinə uyğundur.

**Cədvəl 5. YMnO<sub>3</sub> birləşməsinin atom koordinatları.**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Y1	0	0	0.2726(6)
Y2	1/3	2/3	0.2388(5)
Mn	0.3516(10)	0	0
O1	0.3127(7)	0	0.1647(6)
O2	0.6549(6)	0	0.3367(6)
O3	0	0	0.4974(8)
O4	1/3	2/3	0.0197(5)

Rentgen quruluş tədqiqatları analogi olaraq LuMnO<sub>3</sub> birləşməsi üçün də aparılmışdır. Otaq temperaturunda və normal şəraitdə alınmış atom koordinatları cədvəl 6-da verilmişdir.

**Cədvəl 6. LuMnO<sub>3</sub> birləşməsinin atom koordinatları.**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Lu1	0	0	0.2854(3)
Lu2	1/3	2/3	0.2371(2)
Mn	0.3387(1)	0	0
O1	0.3172(7)	0	0.1736(5)
O2	0.6387(6)	0	0.3447(9)
O3	0	0	0.4740(5)
O4	1/3	2/3	0.0237(8)

Yüksək təzyiqlərdə alınmış rentgen difraksiyası spektrlərinin analizi göstərmişdir ki, YMnO<sub>3</sub> birləşməsinə oxşar olaraq LuMnO<sub>3</sub> birləşməsində də  $P = 0 - 31.2$  GPa təzyiç intervalında quruluş faza keçidi müşahidə edilməmişdir. Təzyiçin təsiri ilə qəfəs

parametrlərinin qiymətlərində və elementar qəfəsin həcmnin qiymətində azalma baş vermişdir ki, bu da yüksək təzyiqlərdə atomlararası rabitələrin uzunluqlarının azalması ilə əlaqədardır. Heksaqonal sinqoniya kifayət qədər yüksək simmetriyaya malik kristal quruluşdur.  $\text{RMnO}_3$  birləşmələrində müşahidə edilən  $C_{6v}$ ,  $P6_3cm$  fəza qrupu heksaqonal sinqoniyalı fəza qrupları arasında sıra nömrəsi kifayət qədər yüksəkdir (185).  $\text{LuMnO}_3$  birləşməsinin elementar qəfəsinin həcmnin təzyiqdən asılılıqlarının analiz edilməsi zamanı görünmüşdür ki, təzyiqin qiyməti artdıqca qəfəs parametrlərinin qiymətlərində  $k_l = (1/l_0)(dl/dP)_T$  qanunu ilə azalma baş verir. Müəyyən edilmişdir ki,  $a$  və  $c$  qəfəs parametrlərinin təzyiqdən asılı olaraq xətti sıxılma əmsalları:  $k_a = 0.0012(1)\text{GPa}^{-1}$ ,  $k_c = 0.0006(9)\text{GPa}^{-1}$  qiymətlərinə uyğundur. Berç-Murnagan tənliyindən alınmış empirik parametrlər isə  $B_0 = 237(7)\text{ GPa}$  və  $B' = 4(1)$  qiymətlərinə uyğun gəlmişdir.

Raman spektroskopiyası metodu ilə otaq temperaturunda və  $P \approx 0\text{-}30\text{ GPa}$  təzyiq intervalında  $\text{YMnO}_3$  və  $\text{LuMnO}_3$  birləşmələrinin atom dinamikaları tədqiq edilmişdir. Rentgen difraksiyası metodu ilə alınmış nəticələrin təsdiqi olaraq quruluş fəza keçidi müşahidə edilməmişdir.  $\nu = 250\text{-}900\text{ sm}^{-1}$  tezlik intervalında hər bir birləşmə üçün müxtəlif təzyiqlərdə Raman spektrləri alınmışdır. Spektrlər Qaus funksiyası ilə analiz edilərək rəqs modalarının qiymətləri müəyyən edilmiş, onların təzyiq asılılıqları alınmışdır.

$\text{YMn}_2\text{O}_5$  birləşməsində aşağı temperaturlar oblastında maqnit xassələrini tədqiq etmək, antiferromaqnit-paramaqnit fəza keçidinə yüksək təzyiqin təsirini öyrənmək və bu birləşmə üçün P-T fəza diaqramını qurmaq üçün  $T = 10\text{-}290\text{ K}$  temperatur və  $P = 0\text{-}6.5\text{ GPa}$  təzyiq intervallarında neytron difraksiyası tədqiqatları aparılmışdır. Ovuntu halında hazırlanmış  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  polikristallarının tədqiqat nümunələrində yüksək təzyiqlər safir zindanlardan ibarət kamerada alınmışdır. Aşağı temperaturlar isə içərisində yüksək təzyiq kamerası yerləşdirilə bilən sistemdə helium vasitəsilə alınmışdır.  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  birləşməsi üçün normal şəraitdə və müxtəlif təzyiqlərdə aşağı temperaturlar oblastında alınmış neytron difraksiyası spektrləri

alınmışdır. Spektrlərin analizi zamanı müəyyən edilmişdir ki, normal şəraitdə otaq temperaturunda  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  birləşməsinin kristal quruluşu da  $\text{BiMn}_2\text{O}_5$  birləşməsinin kristal quruluşuna uyğun gələrək Pbam fəza qruplu ortorombik simmetriyadadır. Spektrlərdən görünür ki,  $T = 10\text{-}290$  K temperatur intervalında quruluş faza çevrilməsi baş verməmişdir.  $T = 40$  K temperaturda  $d_{\text{hkl}} \approx 6.90$  Å,  $5.20$  Å və  $3.98$  Å olduqda yeni maqnit pikləri əmələ gəlmişdir. Spektrlərin analizi göstərmişdir ki, bu dəyişikliklər antiferromaqnit quruluşun yaranması ilə əlaqədardır.  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  birləşməsinin neytron difraksiyası spektrlərindən  $\text{Mn}^{3+}$  və  $\text{Mn}^{4+}$  ionlarının maqnit momentlərinin qiymətləri təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, normal şəraitdə  $T = 10$  K temperaturda  $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$  ionları üçün maqnit momentinin orta qiyməti:  $\mu = 3.30(5) \mu_B$  təyin edilmişdir ki, bu da  $\text{BiMn}_2\text{O}_5$  birləşməsi üçün təyin edilmiş qiymətdən kifayət qədər yüksəkdir. Şəkil 5.20-də  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  birləşməsində müxtəlif təzyiqlərdə  $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$  ionları üçün maqnit momentinin orta qiymətlərinin temperatur asılılıqları verilmişdir. Göründüyü kimi yüksək təzyiğin təsiri ilə maqnit momentlərinin qiymətlərində azalma baş vermişdir.  $T = 10$  K temperaturda  $P = 5.4$  GPa təzyiqdə  $\mu = 1.40(7) \mu_B$  və  $P = 6.5$  GPa təzyiqdə  $\mu = 0.70(5) \mu_B$  qədər azalmışdır. Göründüyü kimi yüksək təzyiğin təsiri ilə  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  multiferroik birləşməsində maqnit xassələri zəifləmişdir. Məlumdur ki, maqnit xassələri olan birləşmələrin quruluş və maqnit xassələrinə yüksək təzyiğin təsiri fərqli ola bilər. Bəzi hallarda təzyiğin təsiri ilə kristal quruluşu təşkil edən maqnit xassəli atomların yaxınlaşması nəticəsində spin-spin qarşılıqlı təsirin güclənməsi baş verir. Lakin, bəzi birləşmələrdə yüksək təzyiqlərdə kristal quruluşda atomların yaxınlaşması nəticəsində atomların rəqsləri zamanı fluktuasiyanın artır və bu zaman uzaq maqnit nizamlılığının qismən pozulması baş verir. Neytron difraksiyası tədqiqatlarından görünür ki,  $\text{BiMn}_2\text{O}_5$  birləşməsində olduğu kimi  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  birləşməsində də  $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$  ionlarının maqnit momentlərinin qiymətlərində azalma baş vermişdir. Neel temperaturunun qiyməti:  $T_N \approx 45$  K təyin edilmişdir.  $P = 1.2$  və  $5.4$  GPa təzyiqlərdə alınmış əyriyərdən görünür ki, yüksək təzyiğin təsiri ilə Neel temperaturunun qiymətində azalma baş vermişdir ki,



bu da yüksək təzyiğin təsiri ilə atomların fluktuasiyasının artması ilə izah olunur. Şəkil 5.10-da  $YMn_2O_5$  multiferroik birləşməsinin aşağı temperaturlarda və yüksək təzyiqlərdə müəyyən edilmiş P-T faza diaqramı verilmişdir. Neel temperaturunun təzyiqlə asılılığı xətti funksiya ilə interpolasiya edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, yüksək təzyiğin təsiri ilə Neel temperaturunun qiyməti  $dT_N/dP = -1.1$  K/GPa əmsalı ilə azalmışdır.

**Altıncı fəsil**də perovskitəbənzər kobaltlarda və ferritlərdə quruluş və maqnit xassələrini öyrənmək məqsədi ilə  $Ca_3Co_2O_6$ ,  $GaFeO_3$  və  $La_{0.7}Ca_{0.3}Mn_{0.5}Fe_{0.5}O_3$  birləşmələrinin kristal quruluşları və maqnit xassələri tədqiq edilmişdir.

$Ca_3Co_2O_6$  birləşməsinin kristal və maqnit quruluşları neytron difraksiyası və rentgen difraksiyası metodları ilə kompleks şəkildə tədqiq edilmişdir. Neytron difraksiyası metodu ilə müəyyən edilmişdir ki, normal şəraitdə bu birləşmə R-3c fəza qruplu romboedrik simmetriyaya malikdir. Müxtəlif mövqələrdə yerləşən Co atomlarının maqnit momentləri təyin edilmiş, onların temperatur asılılıqları alınmışdır.  $P = 0-6.8$  GPa təzyiqlə və  $T = 4-290$  K temperatur intervalında P-T faza diaqramı qurulmuşdur. Faza diaqramından Neel temperaturunun təzyiqlə asılı olaraq artması müşahidə edilmişdir. Aşkar edilmişdir ki, normal şəraitdə aşağı temperaturda  $Ca_3Co_2O_6$  birləşməsi antiferromaqnit xassələrinə malik olur.  $T_N \approx 25$  K Neel temperaturunda antiferromaqnit-paramaqnit faza keçidi baş vermişdir. Təzyiğin qiyməti artdıqca, Neel temperaturunun qiymətində  $dT_N/dP = 0.65$  K/GPa əmsalı ilə artma müşahidə edilmişdir. Co-Co, Co-O və O-O atomlararası məsafələrin təzyiqlə asılılıqları alınmış, rabitələrin uzunluqlarının təzyiqlə asılı olaraq dəyişmə mexanizmi müəyyən edilmişdir.

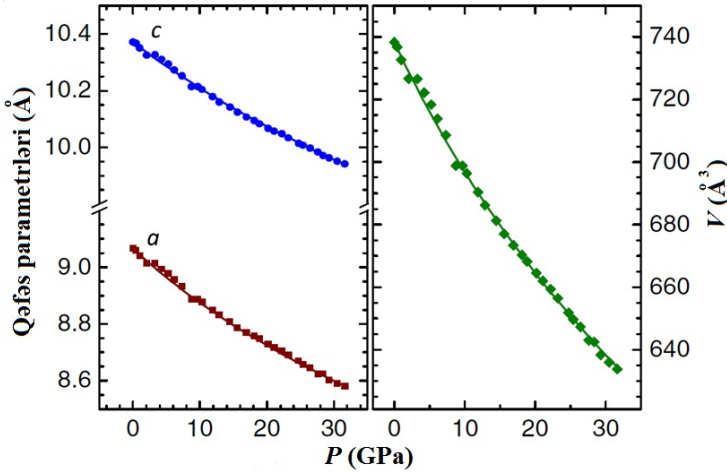
Rentgen difraksiyası metodu ilə yüksək təzyiqlər oblastında quruluş tədqiqatları aparılmışdır. Tədqiqat nəticəsində alınmışdır ki,  $P \approx 32$  GPa təzyiqlə qədər  $Ca_3Co_2O_6$  birləşməsində quruluş çevrilməsi baş vermir və R-3c fəza qruplu romboedrik simmetriya saxlanılır. Otaq temperaturunda və  $P = 0-32$  GPa təzyiqlə intervalında qəfəs parametrlərinin və elementar qəfəsin həcmnin təzyiqlə

asılılıqları alınmışdır. Nisbi həcmnin təzyiqdən asılı olaraq dəyişməsinə nəzərən Berç–Murnagan tənliyi həll edilmiş, təcrübədən alınmış nəticələrə görə:  $B_0 = 154(5)$  GPa və  $B' = 4.0(5)$  əmsalları təyin edilmişdir.

$\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  birləşməsi üçün otaq temperaturunda yüksək təzyiqlər oblastında alınmış bucaq dispersiyalı rentgen difraksiyası spektrlərinin Ritveld metodu ilə yüksək dəqiqliklə ( $R_p = 6.41\%$  və  $R_{wp} = 8.52\%$ ) analizi göstərmişdir ki, normal şəraitdə  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  birləşməsinin kristal quruluşu R-3c fəza qruplu romboedrik simmetriyaya uyğun gəlir. Qəfəs parametrlərinin qiymətləri:  $a = 9.0663(3)$  Å və  $c = 10.372(4)$  Å alınmışdır. Yüksək təzyiqlər oblastında rentgen difraksiyası spektrlərindən görünür ki,  $P = 31.62$  GPa qədər yeni maksimumların əmələ gəlməsi və ya maksimumların yox olması kimi əsaslı dəyişikliklər baş verməmişdir. Bu onunla əlaqədardır ki, quruluş faza keçidi baş verməmişdir. Lakin spektrlərdə Breç bucağının böyük qiymətlərinə tərəf sürüşmə baş vermişdir ki, bu da qəfəs parametrlərinin qiymətlərinin azalmasının nəticəsidir.

$\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  birləşməsinin qəfəs parametrlərinin və elementar qəfəsin həcmnin təzyiqdən asılılıqları şəkil 4-də verilmişdir. Asılılıqlardan müəyyən edilmişdir ki, qəfəs parametrlərinin  $k_i = -(1/a_{i0})(da_i/dP)_T$  xətti sıxılması  $a$  qəfəs parametri üçün  $a_i = 0.0072$  GPa<sup>-1</sup>,  $c$  parametri üçün isə  $k_c = 0.0052$  GPa<sup>-1</sup> qiymətlərini alır. Sıxılma əmsallarının qiymətlərindən görünür ki,  $a$  parametri  $c$  parametrinə nəzərən 40% daha çox sıxılır. Bu onunla əlaqədardır ki, yüksək təzyiqin təsiri ilə kristal quruluş anizotrop olur və sıxılma əsasən  $ab$  müstəvisi üzrə baş verir. Ona görə də  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  kristalları zəncirvari kristal quruluş hesab olunurlar.

Kalsium kobaltitin həcmi sıxılması Berç-Murnagan tənliyi ilə öyrənilmiş,  $B_0 = V(dP/dV)_T$  hərtərəfli sıxılma modulu və  $B' = (dB_0/dP)_T$  onun təzyiqə görə birinci tərtib törəməsi təyin edilmişdir. Təcrübə nəticələrindən alınmışdır ki, bu əmsallar:  $B_0 = 154(5)$  GPa və  $B' = 4.0(5)$  qiymətlərinə uyğundur.



**Şəkil 4.  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  birləşməsinin qəfəs parametrlərinin və elementar qəfəsin həcmnin otaq temperaturunda təzyiç asılılıqları.**

Mürəkkəb oksidlərdə maqnit xassələrinə malik olan atomların kristal quruluşda növbələşməsi ilə əmələ gələn maqnit xassələrin öyrənilməsi məqsədilə Mn və Fe atomlarının bərabər konsentrasiyası ilə alınmış  $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu və maqnit xassələri aşağı temperaturlar oblastında tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmə normal şəraitdə Pnma fəza qruplu və ortarombik simmetriyalı kristal quruluşa malikdir. Normal şəraitdə və otaq temperaturunda kristal quruluşunu təşkil edən atomların koordinatları təyin edilmiş, atomlararası rabitələrin uzunluqları hesablanmışdır. Neytron difraksiyası tədqiqatları nəticəsində müəyyən edilmişdir ki,  $T = 10$  K-ə qədər temperatur intervalında quruluş faza keçidi baş vermir və Pnma fəza qruplu ortarombik simmetriya saxlanılır. Aşağı temperaturlar oblastında qəfəs parametrlərinin temperatur asılılıqları alınmış və bu parametrlərin temperaturdan asılı olaraq dəyişmə mexanizmi müəyyən edilmişdir.

$\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$  birləşməsində kristal quruluşunu təşkil edən  $\text{Mn}/\text{FeO}_6$  oktaedrlərinin daxilində  $\text{Mn}^{3+}$  və  $\text{Fe}^{3+}$  maqnit ionlarının növbələşməsi nəticəsində aşağı temperaturlar oblastında

uzaq maqnit nizamlılığı öyrənilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmə normal şəraitdə və otaq temperaturunda antiferromaqnit xassələrinə malikdir. Aşağı temperaturlar oblastında Mn və Fe atomlarının maqnit momentlərinin qiymətində artma müşahidə edilmişdir, bu da istilik rəqslərinin sönməsi hesabına uzaq maqnit nizamlılığının güclənməsi ilə izah edilmişdir. Atomların maqnit momentlərinin temperatur asılılığı alınmış və bu asılılığa nəzərən müəyyən edilmişdir ki,  $T_N \approx 346$  K Neel temperaturunda antiferromaqnit-paramaqnit faza keçidi baş verir.

Neytron difraksiyası tədqiqatları nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, aşağı temperaturlar oblastında  $\text{GaFeO}_3$  birləşməsi ferrimaqnit xassələrə malik olur və  $T_N \approx 292$  K Neel temperaturunda ferrimaqnit-paramaqnit faza keçidi baş verir. Yüksək təzyiğin təsiri ilə Neel temperaturunun qiyməti artmış və  $P \approx 2.5$  GPa təzyiqdə otaq temperaturunda maqnit xassələrə malik olmuşdur. Aşağı temperaturlarda və yüksək təzyiqlərdə  $\text{GaFeO}_3$  multiferroikin P-T faza diaqramı qurulmuşdur. Fərqli kristallik mövqələrdə dayanan Fe1, Fe2 və Fe3 atomları üçün  $\mu$  maqnit momentləri təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, kristal quruluşda F3 atomları ilə Ga2 atomları eyni mövqedə yerləşirlər. Ona görə də  $\text{GaFeO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu  $\text{Ga/FeO}_6$  oktaedrləri ilə yanaşı, həm də  $\text{Ga/FeO}_4$  tetraedrlərindən ibarət olduğu müəyyənləşdirilmişdir. Otaq temperaturunda yüksək təzyiqlərdə aparılan rentgen difraksiyası tədqiqatları göstərmişdir ki,  $P \approx 21$  GPa təzyiqdə polyar ortorombik fazadan qeyri-polyar ortorombik fazaya quruluş faza keçidi baş verir.

Normal şəraitdə  $\text{GaFeO}_3$  birləşməsinin rentgen difraksiyası spektrlərindən alınmış qəfəs parametrləri:  $a = 8.754(3)$  Å,  $b = 9.396(3)$  Å və  $c = 5.078(2)$  Å olmuşdur. Difraksiya spektrlərinin analiz edilməsi zamanı görünür ki, təzyiğin qiyməti artdıqca qəfəs parametrlərinin qiymətlərində  $k_l = (1/l_0)(dl/dP)_T$  qanunu ilə azalma baş vermişdir:  $k_a = 0.0015\text{GPa}^{-1}$ ,  $k_b = 0.0024\text{GPa}^{-1}$ ,  $k_c = 0.0012\text{GPa}^{-1}$ . Qallium ferritin həcmi sıxılması Berç-Murnagan tənliyi ilə öyrənilmiş,  $B_0 = V(dP/dV)_T$  hərtərəfli sıxılma modulu və  $B' = (dB_0/dP)_T$  onun təzyiqə görə birinci tərtib törəməsi təyin edilmişdir. Təcrübədən alınmış nəticələrə görə  $B_0 = 202.8(2.5)$  GPa və  $B' =$

4.0(5) qiymətlərinə uyğundur.  $Pc2_1n$  fəza qruplu ortorombik fazadan  $Pbnm$  fəza qruplu ortorombik fazaya keçid zamanı, elementar qəfəsin həcmində 7% kiçilmə baş vermişdir.  $GaFeO_3$  birləşməsinin  $Pbnm$  ortorombik fazası üçün də Berç-Murnagan tənliyi həll edilmiş, hərtərəfli sıxılma modulu  $B_0 = 295(10)$  GPa qiymətinə uyğun gəlmişdir.  $P = 30.5$  GPa təzyiqdə  $Pbnm$  fazasının qəfəs parametrləri:  $a = 4.9900(9)$  Å,  $b = 5.070(9)$  Å və  $c = 7.000(15)$  Å qiymətlərinə malik olmuşdur.

$GaFeO_3$  birləşməsində yüksək təzyiqlərdə aşkar edilmiş faza keçidi, almaz zindanlar vasitəsilə aparılmış Raman spektroskopiyası tədqiqatları ilə də təsdiq edilmişdir.

**Yeddinci fəsil**də barium heksaferritdə Fe atomlarının diamagnit metal atomları ilə qismən əvəz edilməsi zamanı baş verən quruluş dəyişmələrini öyrənmək məqsədi ilə  $BaFe_{12-x}Me_xO_{19}$  ( $Me = Ga$ ;  $x = 0.1, 0.3, 0.6, 0.9, 1.2$ ) birləşmələri alınmış, nümunələrin kristal quruluşları və atom dinamikaları tədqiq edilmişdir.  $BaFe_{12-x}Ga_xO_{19}$  ( $0.1 \leq x \leq 1.2$ ) nümunələri üçün otaq temperaturunda, normal şəraitdə rentgen difraksiyası metodu ilə alınmış spektrlərin analizindən məlum olmuşdur ki, normal şəraitdə və otaq temperaturunda bu birləşmələrin kristal quruluşları  $P6_3mmc$  fəza qruplu heksaqonal kristal quruluşa uyğun gəlir. Birləşmələrin kristal quruluşlarını təşkil edən atomların koordinatları təyin edilmiş, atomlararası məsafələr və rabitələrarası bucaqlar hesablanmışdır. Aşkar edilmişdir ki,  $BaFe_{12-x}Ga_xO_{19}$  birləşmələrində Ga atomlarının  $x$  konsentrasiyasının artması ilə qəfəs parametrlərinin qiymətlərində artma baş verir. Bu hadisə,  $Ga^{3+}$  ionlarının  $Fe^{3+}$  ionlarına nəzərən daha böyük ion radiuslarına malik olması ilə izah edilmişdir. Qəfəs parametrlərinin qiymətləri cədvəl 7-də göstərilmişdir.

Kristal quruluşda baş verən dəyişikliklər atom dinamikasında da özünü göstərmişdir. Raman spektroskopiyası ilə alınmış spektrlərdən görünür ki,  $BaFe_{12-x}Ga_xO_{19}$  birləşmələrində Fe atomlarının Ga atomları ilə qismən əvəz edildikcə, atomların rəqs modalarında da sürüşmə baş verir. Rəqs modalarının tezliklərinin Ga atomlarının  $x$  konsentrasiyasından asılılıqları müəyyən edilmişdir.

**Cədvəl 7. BaFe<sub>12-x</sub>Ga<sub>x</sub>O<sub>19</sub> (x = 0.1, 0.3, 0.6, 0.9 və 1.2) birləşmələrinin otaq temperaturunda qəfəs parametrləri və elementar qəfəsin həcmi.**

Birləşmə	Qəfəs parametrləri		
	a, Å	c, Å	V, Å <sup>3</sup>
BaFe <sub>11.9</sub> Ga <sub>0.1</sub> O <sub>19</sub>	5.878(8)	23.154(3)	800.3
BaFe <sub>11.7</sub> Ga <sub>0.3</sub> O <sub>19</sub>	5.875(2)	23.135(1)	798.6
BaFe <sub>11.4</sub> Ga <sub>0.6</sub> O <sub>19</sub>	5.871(5)	23.114(9)	796.9
BaFe <sub>11.1</sub> Ga <sub>0.9</sub> O <sub>19</sub>	5.866(8)	23.091(8)	794.8
BaFe <sub>10.8</sub> Ga <sub>1.2</sub> O <sub>19</sub>	5.862(1)	23.065(1)	792.6

Qəfəs parametrlərinin cədvəl 7-də verilmiş qiymətlərinə nəzər salsaq görürük ki, Ga atomlarının  $0.1 \leq x \leq 1.2$  konsentrasiyası intervalında *a* qəfəs parametrlərinin qiyməti  $a_0 = 5.878(8)$  Å-dən  $a = 5.862(1)$  Å-ə qədər azalmışdır ki ( $\Delta a = 0.016(7)$  Å), bu da 0.29% təşkil edir. *c* qəfəs parametrlərinin qiymətində daha çox azalma müşahidə edilmişdir.  $c_0 = 23.154(3)$  Å-dən  $c = 23.065(1)$  Å-ə qədər azalmışdır ki ( $\Delta c = 0.089(2)$  Å), bu da 0.38% təşkil edir. Rentgen difraksiyası ilə təyin edilmiş atom koordinatlarının qiymətləri cədvəl 8-də verilmişdir.

Diamond 3.2 proqramında müəyyən edilmişdir ki, Fe atomlarını Ga atomları ilə qismən əvəz etdikdə: Fe(5)/Ga(5)O<sub>6</sub>, Fe(1)/Ga(1)O<sub>6</sub>, Fe(5)/Ga(5)O<sub>6</sub>, Fe(1)/Ga(1)O<sub>6</sub>, Fe(4)/Ga(4)O<sub>6</sub> və Fe(5)/Ga(5)O<sub>6</sub> oktaedrləri, Fe(2)/Ga(2)O<sub>5</sub> bipiramidaları və Fe(3)/Ga(3)O<sub>4</sub> tetraedrləri əmələ gəlir.

BaFe<sub>12-x</sub>Ga<sub>x</sub>O<sub>19</sub> birləşmələrində Ga atomlarının *x* konsentrasiyasının artması ilə ( $0.1 \leq x \leq 1.2$  intervalında) kimyəvi təzyiqli nəticəsində  $\vec{a}$  və  $\vec{b}$  oxlarına nisbətən  $\vec{c}$  oxu istiqamətində daha çox sıxılma baş verir. Heksaqonal kristal quruluş  $\vec{a}\vec{b}$  müstəvisi üzrə daha dayanıqlı olur.

Rentgen quruluş tədqiqatları göstərmişdir ki, hekşaonal ferritlərin və onların birləşmələrinin kristal quruluşları müxtəlif poliedrlərdən: Fe(Me)O<sub>6</sub> oktaedrlərindən, Fe(Me)O<sub>5</sub> bipiramidalarından və Fe(Me)O<sub>4</sub> tetraedrlərindən ibarətdir və uzaq maqnit nizamlılığının yaranma səbəbi, bu poliedrlərin mərkəzlərində

yerləşən  $\text{Fe}^{3+}$  maqnit ionlarının müəyyən ox istiqamətində nizamlı düzülüşüdür.

**Cədvəl 8.  $\text{BaFe}_{11.9}\text{Ga}_{0.1}\text{O}_{19}$  birləşməsinin otaq temperaturunda atom koordinatları.**

Atom	$x$	$y$	$z$
Ba	2/3	1/3	1/4
Fe1(Ga1)	0.00000	0.00000	0.00000
Fe2(Ga2)	0.00000	0.00000	0.2573(1)
Fe2(Ga2)	0.00000	0.00000	1/4
Fe3(Ga3)	1/3	2/3	0.0274(1)
Fe4(Ga4)	1/3	2/3	0.1889(8)
Fe5(Ga5)	0.1668(9)	0.3374(1)	-0.1082(9)
O1	0.00000	0.00000	0.1501(6)
O2	1/3	2/3	-0.0551(2)
O3	0.1887(5)	0.3643(1)	1/4
O4	0.1555(9)	0.3129(1)	0.0518(2)
O5	0.5033(9)	0.0052(1)	0.1490(8)

$\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$  kristallarında Fe atomlarının qismən Ga və In atomları ilə əvəz edilməsi nəticəsində sintez edilmiş  $\text{BaFe}_{11.1}\text{Ga}_{0.9}\text{O}_{19}$  və  $\text{BaFe}_{11.1}\text{In}_{0.9}\text{O}_{19}$  birləşmələrinin kristal quruluşları uyğun olaraq  $P = 0-5.3$  GPa və  $P = 0-5.5$  GPa təzyiq intervallarında neytron difraksiyası metodu ilə tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, normal şəraitdə bu birləşmələrin kristal quruluşu  $P6_3/mmc$  fəza qruplu heksaqonal quruluşa uyğun gəlir. Otaq temperaturunda və  $P \approx 5$  GPa-a qədər yüksək təzyiqlər oblastında bu birləşmələrin kristal quruluşu dəyişməz olaraq  $P6_3/mmc$  fəza qəfəsli heksaqonal simmetriya saxlanılır. Tədqiqat işində, elementar qəfəsin həcmi və qəfəs parametrlərinin qiymətlərinin təzyiq asılılıqları müəyyən edilmiş, qəfəs parametrlərinin xətti sıxılma əmsalları təyin edilmişdir.  $\text{BaFe}_{11.1}\text{Ga}_{0.9}\text{O}_{19}$  və  $\text{BaFe}_{11.1}\text{In}_{0.9}\text{O}_{19}$  birləşmələrinin həcmi sıxılması Berç-Murnaqaq tənliyi ilə öyrənilmişdir. Təcrübədən alınmış nəticələrə görə hərtərəfli sıxılma modulları təyin edilmişdir.

## NƏTİCƏ

1. Perovskit kristal quruluşa malik olan  $\text{BaTiO}_3$  klassik seqnetoelektrik birləşməsində Ti atomlarının qismən Mn atomları ilə əvəzləmələri aparılmış,  $0 \leq x \leq 0.12$  konsentrasiya intervalında  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  birləşmələri sintez edilmişdir. Mn atomlarının  $x$  konsentrasiyadan asılı olaraq tetraqonal, heksaqonal və romboedrik quruluş fazalarının formalaşma qanunauyğunluqları müəyyən edilmişdir. İlk dəfə bu fazalar üçün atom koordinatları və atomlararası məsafələr təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki,  $\text{BaTi}_{0.99}\text{Mn}_{0.01}\text{O}_3$  birləşməsində  $T_K \approx 400$  K Kūri temperaturunda tetraqonal-kubik quruluş faza keçidi baş verir.

2. Heksaqonal kristal quruluşlu  $\text{BaMnO}_3$  antiferromaqnit birləşməsindəki Mn atomlarının Ti atomları ilə qismən əvəzləmələri aparılmış və  $\text{BaMn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$  ( $0 \leq x \leq 0.25$ ) birləşmələrində uzaq maqnit nizamlılığının formalaşma mexanizmləri öyrənilmişdir. Romboedrik və heksaqonal fazaların quruluş və maqnit xassələri təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki,  $\text{BaMnO}_3$  üçün Neel temperaturu  $T_N = 230$  K olduğu halda,  $\text{BaMn}_{0.75}\text{Ti}_{0.25}\text{O}_3$  birləşməsində  $T_N = 100$  K olur. Ti atomlarının  $x$  konsentrasiyasından asılı olaraq  $\text{BaMn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$  sistemində Neel temperaturunun qiymətinin azalma mexanizmi müəyyən edilmişdir.

3.  $\text{BaTi}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu və atom dinamikası otaq temperaturunda yüksək təzyiqin təsiri ilə tədqiq edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, otaq temperaturunda  $P \approx 20$  GPa təzyiqdə P4mm tetraqonal quruluştan Pm-3m kubik quruluşa faza keçidi baş verir. Hər bir faza üçün qəfəs parametrlərinin dəyişmə mexanizmləri müəyyənləşdirilmişdir. Müxtəlif fazalar üçün Berç–Murnagan hal tənliyi həll edilmiş və müəyyən edilmişdir ki, tetraqonal faza üçün  $B_0 = 121(3)$  GPa, kubik faza üçün:  $B_0 = 147(8)$  GPa qiymətlərinə uyğun gəlir.

4.  $P = 0-25.75$  GPa yüksək təzyiqlər intervalında heksaqonal kristal quruluşa malik olan  $\text{YMnO}_3$  perovskitəbənzər manqanitin kristal quruluşu və atom dinamikası tədqiq edilərək göstərilmişdir ki, P6<sub>3</sub>cm fəza qruplu heksaqonal simmetriya saxlanılır və quruluş faza keçidi



baş vermir.  $\text{YMnO}_3$  üçün Berç–Murnagan hal tənliyi həll edilmiş və hərtərəfli sıxılma modulu üçün:  $B_0 = 214(7)$  GPa qiyməti alınmışdır.

5. Otaq temperaturunda yüksək təzyiqlərdə ( $P = 0-31.2$  GPa)  $\text{LuMnO}_3$  multiferroikinın kristal quruluşu və atom dinamikası tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, göstərilən təzyiq intervalında  $P6_3cm$  fəza qruplu heksaqonal simmetriya saxlanılır və quruluş faza keçidi baş vermir. Berç–Murnagan tənliyi həll edilmiş və hərtərəfli sıxılma modulu üçün:  $B_0 = 237(7)$  GPa qiyməti alınmışdır.

6.  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  birləşməsinin kristal və maqnit quruluşları  $T = 4-290$  K aşağı temperaturlar və  $P = 0-6.8$  GPa yüksək təzyiqlər oblastında tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, normal şəraitdə aşağı temperaturlar oblastında  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  birləşməsi antiferromaqnit xassələrinə malik olur və  $T_N \approx 25$  K Neel temperaturunda antiferromaqnit-paramaqnit faza keçidi baş verir. Təzyiqin qiyməti artdıqca, Neel temperaturunun qiymətində  $dT_N/dP = 0.65$  K/GPa əmsalı ilə artma müşahidə edilir.

7. Otaq temperaturunda  $P = 0-32$  GPa təzyiq intervalında  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  birləşməsinin kristal quruluşu tədqiq edilmiş və məlum olmuşdur ki, göstərilən təzyiq intervalında quruluş çevrilməsi baş vermir və  $R-3c$  fəza qruplu romboedrik simmetriya saxlanılır. Nisbi həcm təzyiqdən asılı olaraq dəyişməsinə nəzərən Berç–Murnagan tənliyi həll edilmiş, təcrübədən alınmış nəticələrə görə:  $B_0 = 154(5)$  GPa və  $B' = 4.0(5)$  əmsalları təyin edilmişdir.

8.  $\text{GaFeO}_3$  multiferroikinın geniş temperatur və təzyiq diapozonunda P-T faza diaqramı qurulmuşdur.  $P \approx 21$  GPa təzyiqdə polyar ortorombik fazadan qeyri-polyar ortorombik fazaya quruluş faza keçidi aşkar edilmişdir. Aşağı temperaturlar oblastında ferrimaqnit-paramaqnit faza keçidinin temperaturu  $T_N \approx 292$  K müəyyən edilmiş, Neel temperaturunun təzyiqdən asılılıq mexanizmi verilmişdir.

9.  $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MeO}_3$  ( $\text{Me} = \text{Mn}, \text{Fe}$ ) birləşməsində Mn və Fe atomlarının bərabər konsentrasiyası ilə otaq temperaturunda bu birləşmədə uzaq maqnit nizamlılığı müəyyən edilmişdir. Aşağı temperaturlar oblastında həm antiferromaqnit, həm də ferromaqnit klasterlərindən ibarət olan mürəkkəb maqnit quruluşu müşahidə edilmiş,  $T_N \approx 346$  K temperaturda antiferromaqnit-paramaqnit faza

keçidi aşkarlanmışdır. Göstərilmişdir ki, otaq temperaturundan  $T = 4$  K-ə qədər soyudulduqda, Mn/Fe atomlarının maqnit momentlərinin orta qiyməti  $\mu_{\text{Mn/Fe}} = 0.8(4)$   $\mu_B$ -dan  $\mu_{\text{Mn/Fe}} = 1.3(1)$   $\mu_B$ -a qədər artır. Elementar qəfəsin həcmi üçün istidən genişlənmə əmsalı təyin edilmişdir ( $\alpha = 6.89 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ).

10. Fe atomlarının Ga atomları ilə qismən əvəzlənməsi ilə sintez edilmiş  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$  ( $0.1 \leq x \leq 1.2$ ) birləşmələrinin kristal quruluşlarında baş verən dəyişikliklərin Ga atomlarının  $x$  konsentrasiyasından asılılıqları öyrənilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, Ga atomlarının  $0.1 \leq x \leq 1.2$  intervalında  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$  birləşmələri dayanıqlı heksaqonal kristal quruluşa malik olurlar. Fe atomları Ga atomları ilə qismən əvəz edildikcə, rəqs modalarının tezlikləri  $k_{\text{vor}} = 0.0155(8)$  əmsalı ilə dəyişir.

11. Otaq temperaturunda  $P = 0-5.3$  GPa yüksək təzyiqlər intervalında  $\text{BaFe}_{11.1}\text{Ga}_{0.9}\text{O}_{19}$  birləşməsinin kristal quruluşu tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, göstərilən təzyiq intervalında bu birləşmənin kristal quruluşunda heç bir faza keçidi baş vermir.  $\text{BaFe}_{11.1}\text{Ga}_{0.9}\text{O}_{19}$  heksaferriti üçün Berç–Murnaqaan tənliyi həll edilmiş və hərtərəfli sıxılma modulunun qiyməti:  $B_0 = 134(7)$  GPa təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki,  $\text{BaFe}_{11.1}\text{Ga}_{0.9}\text{O}_{19}$  birləşməsində müxtəlif kristalloqrafik mövqələrdə dayanan Fe atomlarının maqnit momentləri  $\mu_{\text{min}} = 3.11$   $\mu_B$ -dan  $\mu_{\text{max}} = 3.72$   $\mu_B$ -ə qədər dəyişir.

12. Otaq temperaturunda  $P = 0-5.5$  GPa yüksək təzyiqlər intervalında  $\text{BaFe}_{11.1}\text{In}_{0.9}\text{O}_{19}$  birləşməsinin kristal quruluşu tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, göstərilən təzyiq intervalında bu birləşmənin kristal quruluşunda heç bir faza keçidi baş vermir.  $\text{BaFe}_{11.1}\text{In}_{0.9}\text{O}_{19}$  heksaferriti üçün Berç–Murnagan tənliyi həll edilmiş və hərtərəfli sıxılma modulunun qiyməti:  $B_0 = 128(6)$  GPa təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki,  $\text{BaFe}_{11.1}\text{In}_{0.9}\text{O}_{19}$  birləşməsində müxtəlif kristalloqrafik mövqələrdə dayanan Fe atomlarının maqnit momentləri  $\mu_{\text{min}} = 3.13$   $\mu_B$ -dan  $\mu_{\text{max}} = 3.74$   $\mu_B$ -ə kimi dəyişir.

13. Müəyyən edilmişdir ki, yüksək təzyiqin təsiri ilə mürəkkəb oksidlərdə: perovskitlərdə və heksaferritlərdə kristal quruluşu

simmetriyasının yüksəlməsi baş verir. Monoklin-ortorombik, ortorombik-tetraqonal, tetraqonal-heksaqonal, tetraqonal-kubik quruluş faza keçidləri müşahidə edilir. Lakin yüksək simmetriyaya malik olan heksaferritlərdə və heksaqonal simmetriyaya malik perovskitlərdə quruluş faza keçidi baş vermir, heksaqonal quruluş saxlanılır. Yüksək təzyiğin təsiri ilə yalnız qəfəs parametrlərində və elementar qəfəsin həcmnin qiymətlərində azalma baş verir.

### **Dissertasiya mövzusu üzrə çap olunmuş elmi işlər**

1. Джабаров, С.Г., Козленко, Д.П., Кичанов, С.Е., Лукин, Е.В., Савенко, Б.Н., Мамедов, А.И., Лате, К. Исследование структурных изменений вмультиферроике  $\text{BiMnO}_3$  при высоком давлении // XXII Международное совещание и Международная молодежная конференция «Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния» РНИКС-2012, Санкт-Петербург, Россия: -15–19 октября, -2012, с. 60.
2. Jabarov, S.H., Kozlenko, D.P., Dang, N.T., Kichanov, S.E., Mammadov, A.I., Savenko, B.N. Crystal Structure of Multiferroic  $\text{BiMnO}_3$  at High Pressures and Temperatures // International Conference on Nanoscale Magnetism (ICNM2013), Istanbul, Turkey: -02-06 September, -2013, p.53.
3. Kozlenko, D.P. Structural polymorphism in multiferroic  $\text{BiMnO}_3$  at high pressures and temperatures / D.P. Kozlenko, N.T. Dang, S.H. Jabarov, A.A. Belik, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, C. Lathe, L.S. Dubrovinsky, V.Yu. Kazimirov, M.B. Smirnov, B.N. Savenko, A.I. Mammadov, E. Takayama-Muromachi, L.H. Khiem // Journal of Alloys and Compounds, -2014. 585. -p.741-747.
4. Turchenko, V., Jabarov, S., Trukhanov, A., Bobrikov, I. Neutron investigation of crystal and magnetic structures of  $\text{BaFe}_{11.7}\text{Al}_{0.3}\text{O}_{19}$ , 1<sup>st</sup> International Scientific of young scientist and specialist // The role of multidisciplinary approach in solution of actual problems of fundamental and applied sciences (earch, technical and chemical), Baku, Azerbaijan: -15-16 October, -2014, p.255-257.

5. Kozlenko, D.P., Jabarov, S.H., Lukin, E.V., S.E. Kichanov, L.S. Dubrovinsky, A structural phase transition in multiferroic  $\text{YMn}_2\text{O}_5$  at high pressure // Annual Reports of Bayerisches Geoinstitut, Bayreuth, Germany: - 19 December, -2014, p.157-158.
6. Jabarov, S.H., Kozlenko, D.P., Dang, N.T., Kichanov, S.E., Mammadov, A.I., Lukin, E.V., Savenko, B.N., Dubrovinsky, L.S. Structural studies of the P-T phase diagram of  $\text{BiMnO}_3$  // Annual Reports of Bayerisches Geoinstitut, Bayreuth, Germany: - 19 December, -2014, p.158-159.
7. Джабаров, С.Г. Кристаллическая структура титаната бария при воздействии давления и температуры // Успехи физики металлов, -2015, т.16, -с.239-262.
8. Jabarov, S., Ngoc Toan, D., Kozlenko, D., Kichanov, S., Dang, N., The-Long, P., Khiem, L., Savenko, B., Mammadov, A., Dubrovinsky, L. High pressure study on crystal structure of  $\text{BaTi}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_3$  // International Conference Condensed Matter Research at the IBR-2, Dubna, Russia: -11-15 October, -2015, p.74.
9. Dang, N.T., Kozlenko, D.P., Phan The-Lon, Kichanov, S.E., Dang, N.V., Thanh, T.D., Khiem, L.H., Jabarov, S.G., Tran, T.A., Vo, D.B., Savenko, B.N. Polymorphysm of  $\text{BaTiO}_3$  doped with Mn // International Workshop on Nanoscience and Nanotechnology Joint 4th Asia-Pracific Chemical and Biological Microfluidics Conference, Da Nang, Vietnam: -2-4 November, -2015, p.112.
10. Dang, N.T., Kozlenko, D.P., Kichanov, S.E., Dang, N.V., Phan The-Long, Khiem, L.H., Jabarov, S.G., Savenko, B.N. Influence of Fe doping on structural and electric properties of muliferroic  $\text{BaTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$  // International Conference Condensed Matter Research at the IBR-2, Dubna, Russia: -11-15 October, -2015, p.69.
11. Savenko, B., Kichanov, S., Jabarov, S., Kozlenko, D., Lukin, E. Pressure effects on crystal structure and vibrational spectra of an antiferroelectric  $\text{NaNbO}_3$  // International Conference Condensed Matter Research at the IBR-2, Dubna, Russia: -11-15 October, -2015, p.120.
12. Dang, N.T. Structural Polymorphism of Mn-Doped  $\text{BaTiO}_3$  / N.T. Dang, D.P. Kozlenko, T.L. Phan, S.E. Kichanov, N.V. Dang,

- T.D. Thanh, L.H. Khiem, S.H. Jabarov, T.A. Tran, D.B. Vo, B.N. Savenko // *Journal of Electronic Materials*, -2016. 45, -p. 2477-2483.
13. Trukhanov, A.V. Crystal structure, magnetic, and microwave properties of solid solutions  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$  ( $0.1 \leq x \leq 1.2$ ) / A.V. Trukhanov, S.V. Trukhanov, V.A. Turchenko, V.V. Oleinik, E.S. Yakovenko, L.Yu. Matsui, L.L. Vovchenko, V.L. Launets, I.S. Kazakevich, S.G. Dzhabarov // *Physics of the Solid State*, -2016. 58, -p.1792–1797.
14. Dang, N.T. Crystal structure, magnetic properties and conductivity mechanisms of  $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$  / N.T. Dang, V.S. Zakhvalinskii, D.P. Kozlenko, Yu.S. Nekrasova, The-Long Phan, Ta Thu Thang, S.E. Kichanov, T.D. Thanh, B.N. Savenko, L.H. Khiem, S.V. Taran, S.G. Jabarov // *Ferroelectrics*, -2016. 501, 1, -p.129-144.
15. Kozlenko, D.P., Dang, T., Kichanov, S., Lukin, E., Mammadov, A., Jabarov, S., Dubrovinsky, L., Liermann, H.-P., Morgenroth, W., Mehdiyeva, R., Savenko, B., Smotrakov V. Competing magnetic and structural states in multiferroic  $\text{RMn}_2\text{O}_5$  at high pressure // *High Pressure Science and Technology*, 54<sup>th</sup> EHPRG Meeting, Bayreuth, Germany: -4-9 September, -2016, p.228.
16. Kozlenko, D.P. The structural, magnetic and vibrational properties of Ti-doped  $\text{BaMnO}_3$  / D.P. Kozlenko, N.T. Dang, T.L. Phan, S.E. Kichanov, L.H. Khiem, S.G. Jabarov, T.A. Tran, T.V. Manh, A.T. Le, T.K. Nguyen, B.N. Savenko // *Journal of Alloys and Compounds*, -2017. 695, -p.2539-2548.
17. Trukhanov, A.V. Magnetic properties and Mössbauer study of gallium doped M-type barium hexaferrites / A.V. Trukhanov, V.G. Kostishyn, L.V. Panina, S.H. Jabarov, V.V. Korovushkin, S.V. Trukhanov, E.L. Trukhanova // *Ceramics International*, -2017. 43, 15, -p.12822-12827.
18. Jabarov, S.H. Structural phase transition in  $\text{BaTiO}_3$  at a constant volume under conditions of thermobaric effects / S.H. Jabarov, A.I. Mammadov, A.V. Trukhanov // *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, -2017, 11, -p.223-225.
19. Cabarov, S.H.  $\text{BaTiO}_3$  və  $\text{BaMnO}_3$  polikristallarının neytron difraksiyası ilə tədqiqi // *AJP Fizika*, -2017. 2, -s.7-9.

20. Cabarov, S.H.  $BaTi_{1-x}Fe_xO_3$  bərk məhlullarının quruluş və səth xassələri / S.H. Cabarov, Ə.İ. Məmmədov, R.Z. Mehdiyeva, R.E. Hüseyinov, İ.B. Baykulov // AJP Fizika, -2017. 4, -s.20-23.
21. Jabarov, S.H., Dang, N.T., Kozlenko, D.P., Kichanov, S.E., Mamedov, A.I., Savenko, B.N. Structural and magnetic properties of  $La_{0.7}Ca_{0.3}Mn_{0.5}Fe_{0.5}O_3$  // International Conference Condensed Matter Research at the IBR-2, Dubna, Russia: -9-12 October, -2017. p.115.
22. Abiyev, A.S., Trukhanov, A.V., Trukhanov, S.V., Dang, N.T., Jabarov, S.H. Crystal structure, the raman spectra of solid solutions  $BaFe_{12-x}Ga_xO_{19}$ , “LI Зимняя школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния” / ПИЯФ, Гатчина, Россия: -11-16 марта, -2017. с.25.
23. Jabarov, S.H., Dang, N.T., Kozlenko, D.P., Kichanov, S.E., Mammadov, A.I., Savenko, B.N. Structural polymorphism of Ti-doped  $BaMnO_3$  // “LI Зимняя школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния”, ПИЯФ, Гатчина, Россия: -11-16 марта, -2017. с.31.
24. Jabarov, S.H., Trukhanov, A.V., Trukhanov, S.V., Dang, N.T. Crystal structure and Raman spectra of solid solutions  $BaFe_{12-x}Ga_xO_{19}$  // IV Международная конференция «Многомасштабное моделирование структур, Строение вещества, Наноматериалы и нанотехнологии», Тула, Россия: -18-21 сентября, -2017 г. с.12-14.
25. Джабаров, С.Г., Труханов, А.В., Мамедов, А.И., Труханов, С.В., Мехтиева, Р.З., Данг, Н.Т. Кристаллическая структура и магнитные свойства твердых растворов  $BaFe_{12-x}Ga_xO_{19}$  ( $0.1 \leq x \leq 1.2$ ) // XVIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества, Екатеринбург, Россия: -16-23 ноября, -2017. с.46.
26. Jabarov, S.H., Dang, N.T., Kozlenko, D.P., Kichanov, S.E., Mammadov, A.I., Dubrovinsky, L.S., Mehdiyeva, R.Z., Savenko, B.N. High-pressure effect on the crystal structure of the multiferroics  $YMnO_3$  and  $LuMnO_3$  // Конференция «Молодежь в науке - 2.0'17», Минск, Беларусь: -30 октября – 2 ноября, -2017. с.264.

27. Cabarov, S.H. Yüksək təzyiqlərdə  $\text{BaTi}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_3$  birləşməsində quruluş faza keçidləri // AJP Fizika, -2018. XXIV, 1, -s.33-37.
28. Маммадов, А.И. Структурные свойства и атомная динамика твердых растворов  $\text{BaMn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$  / А.И. Маммадов, С.Г. Джабаров, Р.З. Мехдиева, С.Е. Кичанов, Р.Э. Гусейнов, Н.Т. Данг, И.Б. Байкулов // Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Xəbərləri Fizika-texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, fizika və astronomiya, -2018. 2, -s.30-34.
29. Cabarov, S.H. Yüksək təzyiqlərdə  $\text{YMnO}_3$  və  $\text{LuMnO}_3$  birləşmələrinin quruluş xassələri // ADPU, Pedaqoji universitetin xəbərləri, -2018. № 1, -s.109-116.
30. Cabarov, S.H.  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$  ( $x = 0.1, 0.3$ ) birləşmələrində termodinamik parametrlərin dəyişmə xassələri // AZTU, Elmi əsərlər, -2018. № 1, -s.55-59.
31. Jabarov, S.H. Structural and thermal analysis of  $\text{BaFe}_{11.9}\text{Ga}_{0.1}\text{O}_{19}$  and  $\text{BaFe}_{11.7}\text{Ga}_{0.3}\text{O}_{19}$  // International Journal of Modern Physics B, -2018. v.32, -p.1850303.
32. Kozlenko, D.P. Pressure-induced modifications of the magnetic order in the spin-chain compound  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$  / D.P. Kozlenko, N.T. Dang, N.O. Golosova, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, P.J. Lampen Kelley, E.M. Clements, K.V. Glazyrin, S.H. Jabarov, T.L. Phan, B.N. Savenko, H. Srikanth, M.H. Phan // Physical Review B, -2018. V.98, -p.134435.
33. Cabarov, S.H. Perovskit birləşmələrin kristal və maqnit quruluşları // Bakı Universitetinin Xəbərləri, Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, -2018. 1, -s.134-148.
34. Dang, N.T. Effect of Fe doping on structure, magnetic and electrical properties  $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$  manganite / N.T. Dang, V.S. Zakhvalinskii, D.P. Kozlenko, The-Long Phan, S.E. Kichanov, S.V. Trukhanov, A.V. Trukhanov, Yu.S. Nekrasova, S.V. Taran, S.V. Ovsyannikov, S.H. Jabarov, E.L. Trukhanova // Ceramics International, -2018. V.44, -p.14974-14979.
35. Dang, N.T. Effect of Fe doping on structure and magnetotransport properties of perovskite manganite / N.T. Dang, V.S. Zakhvalinskii, D.P. Kozlenko, The-Long Phan, S.E. Kichanov,

- S.V. Trukhanov, A.V. Trukhanov, Yu.S. Nekrasova, S.V. Taran, S.V. Ovsyannikov, S.H. Jabarov // *The European Physical Journal Plus*, -2018. v.133, -p.296.
36. Trukhanov, S.V. Magnetotransport properties and phase separation in iron substituted lanthanum-calcium manganite / S.V. Trukhanov, A.V. Trukhanov, N.T. Dang, V.S. Zakhvalinskii, D.P. Kozlenko, The-Long Phan, S.E. Kichanov, S.V. Ovsyannikov, S.H. Jabarov, An.V. Trukhanov, E.L. Trukhanova, D.A. Vinnik, S.A. Gudkova // *Materials Research Express*, -2018. v.5, -p.086108.
37. Argymbek, B.K. Crystal and magnetic structures of granular powder spinel Mn–Zn and Ni–Zn ferrites / B.K. Argymbek, S.E. Kichanov, D.P. Kozlenko, E.V. Lukin, A.T. Morchenko, S.G. Dzhabarov, B.N. Savenko // *Physics of the Solid State*, -2018. v.60, -p.1727–1732.
38. Jabarov, S.H. Crystal structure of  $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_3$  // 26<sup>th</sup> annual meeting of the German Crystallographic Society (DGK), Essen, Germany: -5-8 March, -2018. -P125.
39. Jabarov, S.H., Kozlenko, D.P., Kichanov, S.E., Mammadov, A.I., Mehdiyeva, R.Z., Savenko, B.N. Structural and magnetic structure of multiferroic  $\text{BiMn}_2\text{O}_5$  at low temperature // “ЛП Школа ПИЯФ и Молодежная конференция по физике конденсированного состояния”, ПИЯФ, Санкт-Петербург: -12-17 марта, -2018. с.20.
40. Jabarov, S.H., Mammadov, A.I., Trukhanov, A.V. Magnetic properties of gallium doped barium hexaferrites // Dedicated to the 95th Anniversary of the National leader of Azerbaijan Heydar Aliyev, II international scientific conference of young researchers, Baku Engineering University, Baku, Azerbaijan: -27-28 April, -2018, p.56-57.
41. Джабаров, С.Г., Мехдиева, Р.З., Козленко, Д.П., Маммадов, А.И., Кичанов, С.Е., Dang, N.T., Савенко, Б.Н. Кристаллические структуры барий-стронциевых ниобатов // Конференция по использованию рассеяния нейтронов в конденсированных средах РНИКС-2018, Санкт-Петербург, Россия: -17-21 сентября, -2018. с.178.



42. Cabarov, S.H., Məmmədov, Ə.İ., Mehdiyeva, R.Z., Truxanov, A.V., Lukin, E.V., Hüseyinov, R.E. Yüksək təzyiqlərdə  $BaFe_{11.1}In_{0.9}O_{19}$  birləşməsinin kristal quruluşu // Akademik H.B. Abdullaevin 100 illiyinə həsr olunmuş beynəlxalq konfrans və məktəb “Modern Trends in Condensed Matter Physics” MTCMP-2018, Bakı, Azərbaycan: -24-26 sentyabr, -2018. s.41,
43. Jabarov, S.H., Kozlenko, D.P., Dang, N.T., Kichanov, S.E., Mammadov, A.I., Savenko, B.N. The structural and magnetic properties of  $BaMn_{1-x}Ti_xO_3$  // Конференция «Молодежь в науке - 2018», Минск, Беларусь: -29 октября – 1 ноября, -2018. с.173.
44. Jabarov, S.H., Mammadov, A.I., Trukhanov, A.V. Differential thermal analysis of  $BaFe_{12-x}Ga_xO_{19}$  // “LIII Школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния”, ФКС-2019, ПИЯФ, Гатчина, Россия: -11-16 марта, -2019. с.31.
45. Jabarov, S.H. High pressure effect on the crystal structure of the  $BaTiO_3$  // International Journal of Modern Physics B, -2019. v.33, -p.1950357.
46. Jabarov, S.H. Crystal structure and vibrational spectra of hexagonal manganites  $YMnO_3$  and  $LuMnO_3$  under high pressure / S.H. Jabarov, N.T. Dang, S.E. Kichanov, D.P. Kozlenko, L.S. Dubrovinsky, Je-Geun Park, Seongsu Lee, A.I. Mammadov, R.Z. Mehdiyeva, B.N. Savenko // Materials Research Express, -2019. v.6, -p.086110.
47. Dang, N.T. Structural, magnetic and electronic properties of Ti-doped  $BaFeO_{3-\delta}$  exhibiting colossal dielectric permittivity / N.T. Dang, D.P. Kozlenko, N. Tran, B.W. Lee, T.L. Phan, R.P. Madhugaria, V. Kalappattil, D.S. Yang, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, B.N. Savenko, P. Czarnecki, T.A. Tran, V.L. Vo, L.T.P. Thao, D.T. Khan, N.Q. Tuan, S.H. Jabarov, M.H. Phan // Journal of Alloys and Compounds, -2019. v.808, -p.151760.
48. Cabarov, S.H. Yüksək təzyiqlərdə  $BaFe_{11.1}Ga_{0.9}O_{19}$   $BaFe_{11.1}In_{0.9}O_{19}$  heksaferritlərinin kristal quruluşu // AZTU, Elmi əsərlər, -2019. 1, -s.28-33.
49. Mammadov, A.I. Vibrational properties of  $BaFe_{11.1}Sc_{0.9}O_{19}$  hexaferrite at high and low temperatures / A.I. Mammadov, N.T.

Dang, R.Z. Mehdiyeva, A.V. Trukhanov, R.E. Huseynov, S.V. Trukhanov, S.H. Jabarov // Modern Physics Letters B, -2020. 34, -p.2050381.

50. Jabarov S.H. Probabilistic model of structural phase transition in perovskites / S.H. Jabarov, R.T. Aliyev, N.A. Ismayilova // Modern Physics Letters B, -2021. 35, -p.2150211.

*Crab*

Dissertasiyanın müdafiəsi 21 aprel 2021-ci il tarixində saat 11<sup>00</sup>-da Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya şurasının iclasında keçiriləcək.

Ünvan: Bakı şəh., H. Cavid pr. 131, AZ-1143.

Dissertasiya ilə Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutunun kitabxanasında tanış olmaq mümkündür.

Dissertasiya və avtoreferatın elektron versiyaları Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutunun rəsmi internet saytında yerləşdirilmişdir.

Avtoreferat 16 mart 2021-ci il tarixində zəruri ünvanlara göndərilmişdir.

Çapa imzalanıb: 10.03.2021

Kağızın formatı: A5

Həcm: 78260

Tiraj: 100