

# AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

*Əlyazması hüququnda*

## **La<sub>1-x</sub>Ba<sub>x</sub>MnO<sub>3</sub> BİRLƏŞMƏLƏRİNİN ELEKTROFİZİKİ XASSƏLƏRİNƏ YÜKSƏK TEMPERATURUN TƏSİRİ**

İxtisas: 2203.01 – Elektronika

Elm sahəsi: Fizika

İddiaçı: **Aynur Xəlil qızı Nəbiyeva**

Fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi  
almaq üçün təqdim edilmiş dissertasiyanın

### **AVTOREFERATI**

**Bakı – 2024**

Dissertasiya işi Azərbaycan Respublikasının Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunun “Yüksək gərginliklərin fizikası və texnikası” laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

Elmi rəhbər: Fizika elmləri doktoru, dosent  
**Sakin Həmid oğlu Cabarov**

Rəsmi opponentlər: Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, dosent  
**Ayaz Hidayət oğlu Bayramov**

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor  
**Vaqif Museyib oğlu Salmanov**

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor  
**Müsavər Abdusalam oğlu Musayev**

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Ali Attestasiya Komissiyasının Azərbaycan Respublikasının Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya şurası

Dissertasiya şurasının sədri: Akademik



**Arif Məmməd oğlu Həşimov**

Dissertasiya şurasının  
elmi katibi:



Fizika elmləri doktoru, professor

**Rəfiqə Zabil qızı Mehdiyeva**

Elmi seminarın sədri:



Akademik

**Cavad Şahvələd oğlu Abdinov**

## İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

**Mövzunun aktuallığı və işlənmə dərəcəsi.** Dissertasiya işi mürəkkəb oksidlər arasında xüsusi yer tutan, müxtəlif fiziki xassələrin müşahidə edildiyi perovskit materialların elektron xassələrinin öyrənilməsinə həsr edilmişdir. Məlumdur ki, perovskit kristallarda ferromaqnit, seqnetoelektrik, yarımkəçirici və s. xassələr müşahidə edilə bilər<sup>1</sup>. Perovskit manqanidlərdə əsasən aşağı temperaturalarda maqnit xassələr müşahidə edilsə də, otaq temperaturunda da maqnit xassələrə malik olan birləşmələr mövcuddur.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  birləşmələri otaq temperaturunda maqnit xassələrə malik olan kristallar olduqlarına görə onların müasir elektronikada və spintronikada geniş tətbiq imkanları vardır. Ona görə də bu birləşmələrin quruluşunun, termik, maqnit və elektrik xassələrinin öyrənilməsi, onların tətbiq imkanlarını daha da genişləndirir.

$\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  birləşmələri maraqlı quruluş xassələrinə malik birləşmələrdir. Bu kristallarda kation-kation əvəzləmələrinin aparılması zamanı elektron konfigurasiyasının dəyişməsinə baxmayaraq onların kristal quruluşu dəyişmir. Barium atomlarının  $x = 0.03-0.5$  konsentrasiyalarında ideal perovskit quruluşu malik olan kubik quruluş müşahidə olunur. Digər tərəfdən bu birləşmələr mürəkkəb oksidlər olduğuna görə, onların səthində oksidləşmə baş vermir və uzun müddət sabit kimyəvi tərkibdə qala bilirlər. Ona görə də bu sistemdə baş verən elektron proseslərin öyrənilməsi zamanı alınmış nəticələr, digər perovskitlərdə baş verən prosesləri izah edərkən model obyekt kimi istifadə oluna bilər. Müəyyən edilmişdir ki, bu sistemdə lantan atomlarının konsentrasiyası artdıqca kristalların maqnit xassələri də güclənir. Tədqiqat obyektlərinin bir sıra xassələrinin tədqiq edilməsinə baxmayaraq onlarda baş verən elektron proseslər, elektrofiziki xassələr demək olar ki, tədqiq edilməmişdir. Məlumdur ki, cihaz və qurğular qızmaya məruz qalırlar. Yüksək temperaturalarda termik və elektrik xassələrin tədqiqi zamanı alınmış

---

<sup>1</sup> S.F. Yuk, K.C. Pitike, S.M. Nakhmanson, M. Eisenbach, Y.W. Li, V.R. Cooper, Towards an accurate description of perovskite ferroelectrics: exchange and correlation effects, Scientific Reports, 7, P.43482, 2017.

nəticələr müxtəlif mühitlərdə işləyə bilən çeviricilərin alınması üçün mühüm əhəmiyyət daşıyır. Ona görə də bu işdə,  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) birləşmələri sintez edilmiş, onların quruluşu, defekt əmələgəlmə prosesləri, dielektrik və elektrik xassələri tədqiq edilmişdir. Dielektrik və elektrik xassələrinin tədqiqi  $T = 25-225$  °C temperatur və  $f = 20-10^6$  Hz tezlik intervallarında aparılmış, temperatur və tezlikdən asılı olaraq bu birləşmələrdə elektrik keçiriciliyinin mexanizmi müəyyən edilmişdir. Alınmış nəticələr geniş tətbiq imkanlarına malikdir. Belə ki, maqnit və elektrik xassələrinə malik olan bu materiallar yaddaş qurğularının hazırlanmasında, müasir elektronikada, kosmik cihazlarda və s. istifadə oluna bilər<sup>2</sup>.

Dissertasiya işi, Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutunun “Yüksək gərginliklərin fizikası və texnikası” laboratoriyasının elmi tədqiqat planına əsasən yerinə yetirilmişdir.

### **Tədqiqatın obyekti və predmeti.**

$\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) polikristallarının alınması, onların quruluşunun, defektlərinin, termik və elektrofiziki xassələrinin öyrənilməsi.

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

Dissertasiya işinin məqsədi kation-kation əvəzləmələri ilə alınmış  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  perovskitlərinin kristal və elektron quruluşlarının öyrənilməsi, yüksək temperaturlarda və yüksək tezliklərdə bu birləşmələrin dielektrik və elektrik xassələrinin tədqiq edilməsi, elektron proseslərin baş vermə mexanizminin müəyyənləşdirilməsidir.

Dissertasiya işində qarşıya qoyulmuş məqsədə uyğun olaraq, aşağıdakı məsələlər həll edilmişdir:

- La → Ba kation-kation əvəzləmələri ilə  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) polikristallarının sintez edilməsi, bu tərkiblərin quruluş xüsusiyyətlərinin tədqiq edilərək kristalloqrafik parametrlərinin müəyyən edilməsi.

---

<sup>2</sup> Q. Liu, S. Gao, L. Xu, W. Yue, C. Zhang, H. Kan, Y. Li, G. Shen, Nanostructured perovskites for nonvolatile memory devices, Chemical Society Reviews, 51, P.3341-3379, 2022.

- Təməl prinsipləri əsasında  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  perovskit birləşmələrinin elektron quruluşunun tədqiq edilməsi, Ba atomlarının müxtəlif konsentrasiyalarında alınmış birləşmələr üçün qadağan olunmuş zonanın təyini.
- $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  perovskitlərinin dielektik nüfuzluğunun və dielektrik itkilərinin temperatur və tezliyin təsiri ilə tədqiqi.
- $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) birləşmələrinin elektrik keçiriciliyinin təyin edilməsi, yüksək temperaturların təsiri ilə bu birləşmələrdə yükdaşıyıcıların aktivləşmə mexanizminin tədqiqi.
- $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşmələrində tezliyin təsiri ilə bu birləşmələrdə elektrik keçiriciliyinin dəyişmə mexanizminin müəyyənəndirilməsi.
- $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) birləşmələrində elektron sıxlığının, vakansiyaların və defektlərin barium atomlarının konsentrasiyasından asılı olaraq dəyişməsinin təyini.

**Tədqiqat metodları.** Tədqiqat nümunələrinin sintezi mürəkkəb oksidlər üçün xarakterik olan standart metodla yüksək temperaturlarda yerinə yetirilmişdir. Nümunələrin quruluş faza analizləri rentgen difraksiyası metodu ilə aparılmışdır. Alınmış spektrlər analiz edilərək nümunənin kristalloqrafik parametrləri: simmetriyası, fəza qrupu, qəfəs parametrləri, atom koordinatları və atomlararası məsafələri təyin edilmişdir. Rentgen difraksiyası metodu laboratoriya şəraitində kristalların quruluşunu təyin etmək, sintez prosesindən sonra faza analizlərini aparmaq üçün müasir tədqiqat metodlarındandır.

Kristalların termik xassələri Diferensial Termik Analiz və Termoqravimetrik analiz metodları ilə müqayisəli şəkildə tədqiq edilmişdir. Alınmış nəticələr analiz edilərək yüksək temperaturlarda baş verən fiziki-kimyəvi proseslər öyrənilmişdir. Bu metodlar nümunələrdə yüksək temperaturlarda baş verən bir sıra prosesləri, o cümlədən faza keçidlərini təyin etməyə imkan verir.

Dielektrik və elektrik xassələrinin tədqiq edilməsi zamanı “MNIPI E7-21 impedance analyzer” cihazından istifadə edilmişdir.

Təcrübələr tezlik və temperaturun təsiri ilə aparılmışdır. Alınmış təcrübi məlumatlara əsasən hər bir kristal üçün dielektrik nüfuzluğunun, dielektrik itkisinin və elektrik keçiriciliyinin tezlik və temperatur asılılıqları qurulmuşdur. Bu tədqiqatlar vasitəsilə yarımkeçirici materiallarda baş verən elektron prosesləri öyrənmək, tezlik və temperaturun təsiri ilə yükdaşıyıcıların aktivləşmə prosesini tədqiq etmək mümkündür. Ona görə də  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  polikristalları bu meotdla tədqiq edilmiş, geniş temperatur intervalında elektron proseslər öyrənilmişdir.

$\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  birləşmələrinin elektron prosesləri pozitron spektroskopiyası tədqiqatları ilə öyrənilmiş və bu manqanidlərdə elektron fonon qarşılıqlı təsiri araşdırılmışdır. Doppler spektroskopiyası metodu ilə elektron impuls paylanması spektrlərinə əsasən kristalların defekt quruluşları öyrənilmişdir. Bu metodlar bərk cisimlərdə elektron-pozitron qarşılıqlı təsiri əsasında bir sıra elektron prosesləri və kristallardakı defektləri öyrənməyə imkan verən və son zamanlarda geniş istifadə olunan tədqiqat metodlarıdır.

Tədqiq olunan kristalların elektron quruluşları “Quantumwise” proqramı vasitəsilə hesablanmış və qadağan olunmuş zonanın qiymətləri təyin edilmişdir. Rentgen difraksiyası spektrləri, Ritveld metodu vasitəsi ilə “FullProf” və “Mag2Pol” proqramlarından istifadə edilərək yerinə yetirilmişdir. Kristal quruluşların 3D formatında alınması zamanı “Diamond 3.2”, DTA-TGA spektrlərinin analizi zamanı isə “Origin 9” proqramlarından istifadə edilmişdir.

#### **Müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar:**

1.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) polikristallarının alınması, onların kristal quruluşlarının tədqiq edilərək kristalloqrafik parametrlərinin təyin edilməsi.
2.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  sistemi birləşmələrinin elektron quruluşu, barium atomlarının konsentrasiyasından asılı olaraq bu birləşmələrdə qadağan olunmuş zonanın eninin dəyişməsi.
3.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) birləşmələrinin dielektik itkisinin, dielektrik nüfuzluğunun və elektrik keçiriciliyinin temperatur və tezlik asılılıqları.
4.  $T = 25-225$  °C yüksək temperatur intervalında  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  perovskit birləşmələrində  $T \sim 140$  °C temperaturda yarımkeçirici-metal faza keçidi.

5.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  maqnitlərində  $x$ -in qiymətinin artması ilə məsələlər arasındakı boşluqların sferik radiusunun  $R_{sf} = 0.400, 0.381, 0.330$  nm-ə qədər, silindirik radiusu isə  $R_{sl} = 0.313, 0.295, 0.253$  nm-ə qədər olması.
6. Elektron impuls paylanma spektrinin təhlilinə əsasən barium metalının konsentrasiyasının aşağı qiymətlərində güclü Mn  $d - O p$  hibridləşməsinin müşahidə olunması.

### **Tədqiqatın elmi yeniliyi:**

1.  $\text{LaMnO}_3$  maqnitində La atomlarının Ba atomları ilə qismən əvəz edilməsi ilə  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) polikristalları sintez edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmələr birləşmə halda alınır və kubik simmetriyalı Pm-3m ideal perovskit quruluşuna malik olurlar. Ba atomlarının konsentrasiyası artdıqca qəfəs parametrlərinin qiymətlərində artma müşahidə edilmişdir ki, bu da lantan və barium elementlərinin ion radiuslarındakı fərq ilə izah edilmişdir.
2.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  sisteminin elektron quruluşu tədqiq edilmiş və müəyyən edilmişdir ki, nümunələrdə barium metalının konsentrasiyası artdıqca qadağan olunmuş zonanın eni artır.  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  birləşməsində qadağan olunmuş zonanın eni üçün  $E_g = 0.28$  eV,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün  $E_g = 0.32$  eV və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün isə  $E_g = 0.41$  eV qiymətləri təyin edilmişdir.
3.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) birləşmələrinin dielektrik itkisinin, dielektrik nüfuzluğunun və elektrik keçiriciliyinin temperatur ( $T = 25-225$  °C) və tezlik ( $f = 20-10^6$  Hz) asılılıqlarının tədqiqi zamanı müəyyən edilmişdir ki, temperaturun və tezliyin qiyməti artdıqca bu birləşmələrdə istilik enerjisinin və ya xarici elektrik sahəsinin təsiri ilə daha dərin səviyyələrdə olan yükdaşıyıcıların sərbəst hala keçməsi hesabına elektrik keçiriciliyinin qiyməti artır.
4.  $T = 25-225$  °C yüksək temperatur intervalında  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  perovskit birləşmələrində dərin səviyyələrdə olan yükdaşıyıcıların sərbəst hala keçməsinə uyğun olaraq  $T \sim 140$  °C temperaturda yarımetal faza keçidi aşkar edilmişdir.

5.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  manqanitlərində pozitron annihilyasiyası tədqiqatları zamanı lantan elementinin təsiri ilə güclü elektron fonon qarşılıqlı təsirinin olduğu aşkar edilmişdir. Bu birləşmələrdə vakansiyalar və kation boşluqları ilə əlaqədar olan 0D və əsasən qəfəs təhrifləri ilə əlaqədar olan 3D defektləri müşahidə edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki,  $x$ -in qiymətinin artması ilə məsamələr arası boşluqların sferik radiusu  $R_{sf} = 0.400, 0.381, 0.330$  nm-ə qədər, silindirik radiusu isə  $R_{sl} = 0.313, 0.295, 0.253$  nm-ə qədər kiçilir.

**Tədqiqatın nəzəri və praktiki əhəmiyyəti:** Perovskit manqanitlər yarımkeçirici və ferromaqnit xassələrinə görə elektronikada və spintronikada geniş tətbiq imkanları olan materiallardır. Dissertasiya işinin yerinə yetirilməsi zamanı əldə edilmiş elmi yeniliklər bu materiallar üçün yeni tətbiq imkanları yaradır. Elektrik xassələrinin tədqiqi və elektron proseslərin izah edilməsi zamanı alınmış nəticələr, bu materiallar əsasında yeni çeviricilərin alınması, yaddaş elementlərinin hazırlanması üçün çox vacibdir. Yüksək temperaturlarda alınmış yarımkeçirici-metal faza keçidi  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşmələri əsasında çeviricilərin hazırlanması üçün xüsusi əhəmiyyət daşıyır.

Dissertasiya işi həm də mühüm elmi əhəmiyyətə malikdir. Məlumdur ki, tədqiqat obyektləri ideal perovskit quruluşa malik birləşmələrdir. Perovskitlərdə kation-katoin əvəzləmələri zaman çox zaman perovskit quruluş təhrif olunur və kubik quruluş pozulur. Belə birləşmələrə perovskitəbənzər birləşmələr deyilir. Lakin  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  perovskit birləşmələrində ideal perovskit quruluş saxlanılır. Ona görə də bu birləşmələr, oxşar perovskit birləşmələrin tədqiq edilməsi zamanı model obyekt kimi istifadə oluna bilərlər. Bu səbəbdən də tədqiqatların yerinə yetirilməsi zamanı alınmış nəticələr mühüm əhəmiyyətə malikdir.

#### **Aprobosiyası və tətbiqi:**

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

1. Azərbaycan xalqının ümummilli lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 99-cu ildönümünə həsr olunmuş tələbə və gənc tədqiq-



qatçıların “Gənclər və elmi innovasiyalar” mövzusunda respublika elmi-texniki konfransı, 4-5 may 2022-ci il, Bakı, Azərbaycan.

2. International Conference “Condensed Matter Research at the IBR-2”, Dubna, Russia, April 25-29, 2022, p.188.

3. Международная конференция «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах», 10-15 сентября 2023 г., с.222-223, Махачкала, Россия.

4. II-международная конференция «Фундаментальные и прикладные проблемы физики полупроводников, микро- и наноэлектроники», 27-28 октября 2023 г., с.36-38, Ташкент, Узбекистан.

5. Energetika ixtisasları üzrə kadr hazırlığının aktual məsələləri III Respublika Elmi Konfransı, 17-18 noyabr 2023-cü il, s.118-119, Sumqayıt, Azərbaycan.

6. III международная научная конференция «Современные тенденции развития физики полупроводников: достижения, проблемы и перспективы», 26-27 сентября 2024 г., Ташкент, Узбекистан.

**Nəşrlər.** Dissertasiyanın əsas materialları 12 elmi işdə dərc edilmişdir. Onlardan 6-ı məqalə (hər biri Web of Science və Scopus bazalarında indekslənmə) və 6-ı konfrans tezisidir. Alınmış nəticələr Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutunun elmi-tədqiqatlarının illik hesabatlarında dərc olunmuşdur.

**Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilatın adı:**

Dissertasiya işi, Azərbaycan Respublikasının Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunun “Yüksək gərginliklərin fizikası və texnikası” laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

**Dissertasiya işinin həcmi, quruluşu və əsas məzmunu:**

Dissertasiya işi girişdən, 4 fəsildən, nəticələrdən və 140 adda istifadə olunmuş ədəbiyyat siyahısından ibarətdir. İş ümumilikdə 140 səhifədən, 1 cədvəl, 56 şəkildən ibarət olmaqla 175831 simvoldan ibarətdir.

## IŞIN MƏZMUNU

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

Dissertasiya işinin **I fəsl**li, perovskit quruluşa malik olan birləşmələrin quruluşunun və onlarda baş verən elektron proseslərin öyrənilməsi məqsədi ilə aparılmış tədqiqatlar zamanı alınmış nəticələrin təhlilinə həsr edilmişdir. Kation-kation əvəzləmələri ilə alınmış  $A'_{1-x}A''_xBO_3$  perovskit birləşmələrinin quruluş xüsusiyyətləri təhlil edilmiş, əvəzləmələr zamanı bu tərkiblərdə müşahidə edilən quruluş dəyişiklikləri göstərilmişdir. Perovskit manqanitlərin maqnit və elektrik xassələri haqqənda ətraflı məlumat verilmiş,  $LaMnO_3$  və  $BaMnO_3$  birləşmələrinin maqnit və elektrik xassələri təhlil edilmişdir. Göstərilmişdir ki, manqanitlər əsasən aşağı temperaturlarda maqnit xassələri göstərsələr də, otaq temperaturunda da maqnit xassələrə malik manqanitlər mövcuddur. Bu manqanitlərin müasir elektronikada tətbiq imkanları daha çoxdur. Onların əsasında hazırlanan yaddaş elementləri geniş həcmli materialların uzun müddət saxlanılmasına imkan verir. Fərqli ion radiuslarına malik metal atomları ilə əvəzləmələrlə sintez edilmiş  $A'_{1-x}A''_xBO_3$  perovskit birləşmələrində elektron proseslər, o cümlədən bu birləşmələrin elektron quruluşlarının tədqiqi zamanı alınmış nəticələr təqdim edilmişdir. Göstərilmişdir ki, qismən əvəzləmələr zamanı kristalların elektron konfigurasiyasında əsaslı dəyişikliklər yaranır və buna görə də materialın elektron xassələri dəyişir.  $A'_{1-x}A''_xBO_3$  perovskit birləşmələrinin elektrik keçiriciliyinin mexanizmi göstərilmiş, yarımkeçiricilərə məxsus proseslər izah edilmişdir. Əvvəlki tədqiqatlar zamanı alınmış nəticələrin yekununda dissertasiya işinin mövzusu əsaslandırılmış və  $La_{0.97}Ba_{0.03}MnO_3$ ,  $La_{0.73}Ba_{0.27}MnO_3$  və  $La_{0.5}Ba_{0.5}MnO_3$  perovskit birləşmələrində baş verən elektron proseslərin öyrənilməsinin vacibliyi göstərilmişdir. Ədəbiyyat araşdırmaları nəticəsində göstərilmişdir ki, perovskit manqanitlər və onların bərk məhlulları geniş tətbiq imkanları olan funksional materiallardır. Onların elektrik keçiriciliyinin tədqiq edilməsi, xarici elektrik

sahəsinin tezliyinin və yüksək temperaturların elektrik keçiriciliyinə təsirinin öyrənilməsi bərk cisimlər elektronikasısı üçün mühüm elmi əhəmiyyət daşıyır. Göstərilən xassələrin tədqiq edilməsi, bu materiallar üçün həm də praktiki tətbiq imkanlarını müəyyənləşdirir. Ona görə də dissertasiya işinin mövzusu aktualdır və elektronika istiqamətində aparılan müasir tədqiqatlara tam uyğun gəlir.

**II fəsil**, dissertasiya işinin yerinə yetirilməsi zamanı qarşıya qoyulmuş məqsədə çatmaq üçün aparılmış təcrübi tədqiqatların yerinə yetirilməsi zamanı istifadə edilmiş təcrübi metodlara, alınmış nəticələrin analiz edilməsi üçün istifadə edilmiş müxtəlif metodlara, təcrübələrin yerinə yetirildiyi cihaz və qurğulara həsr edilmişdir. Göstərilmişdir ki, təcrübələr son nəsil müasir cihazlarda yerinə yetirilmişdir.

Tədqiqat obyektlərinin polikristalları standart metodla sintez edilmiş, onların faza analizləri və kristal quruluşları rentgen difraksiyası metodu ilə 40 kV, 40 mA,  $\text{CuK}_\alpha$  - şüalanma ( $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$ ) parametrlərinə malik olan Bruker D8 Advance markalı rentgen difraktometrində tədqiq edilmişdir. Tədqiqatlar otaq temperaturunda və normal şəraitdə yerinə yetirilmişdir.

$\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  polikristallarının termik xassələrinin tədqiqi metodları haqqında da geniş məlumat verilmişdir. Göstərilmişdir ki, dissertasiya işinin yerinə yetirilməsi zamanı Diferensial Skanedici Kalorimetriya (DSK) və Termoqravimetrik Analiz (TQA) metodlarından istifadə edilmişdir. Tədqiqatlar  $25 \text{ }^\circ\text{C} \leq T \leq 950 \text{ }^\circ\text{C}$  temperatur intervalında Mettler Toledo tərəfindən istehsal olunan DSC3 STARe cihazında yerinə yetirilmişdir. Təcrübələr zamanı temperaturun tənzimlənməsi Multistar sensorlar vasitəsilə həyata keçirilmişdir. Ölçmələr arqon (Ar) atmosferində 20 ml/min, 5 °/dəq qızdırılma sürətində yerinə yetirilmişdir. Göstərilmişdir ki, soyutma prosesi Nitrogen Un 1977 Sofriqered Liquid analizator soyutma sistemi ilə aparılmışdır.

Tədqiqat obyektlərinin elektrik və dielektrik xassələri standart metodla ölçülmüşdür. Təcrübələrdə istifadə olunan nümunələrin həndəsi parametrləri  $5 \times 3 \times 3 \text{ mm}^3$  ölçülərində olmuşdur. Dielektrik xassələrinin tədqiqi MNIPI E7-25 impedance analyzer cihazında aparılmışdır. Bu materialların dielektrik xassələrinin tədqiqi zamanı,

elektrik kontaktı olaraq gümüş elektrodlarından istifadə olunmuşdur. Tədqiqatlar zamanı elektrik tutumunun qiyməti təyin edilmiş və bu qiymətə əsasən dielektrik nüfuzluğu, dielektrik itkisi və elektrik keçiriciliyi hesablanmışdır. Təcrübələr  $T = 25-225$  °C yüksək temperaturlarda və  $f = 20-10^6$  Hz tezlik intervalında aparılmışdır.

$\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{O}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{O}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{O}_3$  birləşmələrinin elektron xassələri və defekt halları uyğun olaraq pozitron spektroskopiyası və Doppler spektroskopiyası metodları ilə tədqiq edilmişdir. Bu metodlar elektron-pozitron qarşılıqlı təsiri nəticəsində materialların elektron xassələrini, vakansiyaları və kation boşluqlarını, defektləri və qəfəs təhrif olunmalarını, o cümlədən defektlərin sferik və ya silindrik olmasını təyin etməyə imkan verirlər.

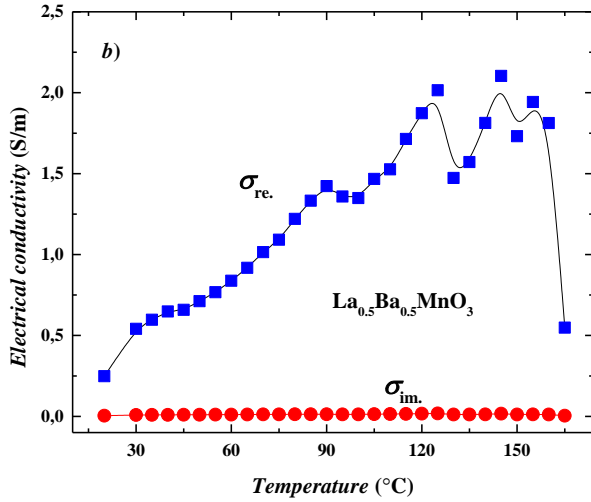
**III fəsil**də  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  perovskitlərinin quruluşu və termik xassələrinin tədqiqi zamanı alınmış nəticələr təqdim edilmişdir.  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{O}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{O}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{O}_3$  mürəkkəb oksidlərinin quruluşunun rentgen difraksiyası metodu ilə tədqiqi zamanı müəyyən edilmişdir ki, otaq temperaturunda bu birləşmələr perovskit quruluşu malik olurlar.  $\text{La} \rightarrow \text{Ba}$  qismən əvəzləmələri zamanı ideal perovskit quruluşu pozulmur və Pm-3m fəza qruplu kubik kristal quruluş saxlanmışdır. Hər bir birləşmə üçün kristalloqrafik parametrlər müəyyən edilmiş, simmetriyası, fəza qrupu, qəfəs parametrləri və atomlar arası məsafələrin qiymətləri təyin edilmişdir. Spektrlərin analiz edilməsi zamanı “Fullprof” və “Mag2Pol” proqramlarından istifadə edilmişdir.

$\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  birləşmələrinin termik xassələri  $25$  °C  $\leq T \leq 950$  °C temperatur intervalında tədqiq edilmişdir. Tədqiqatlar Diferensial Skanedici Kalorimetriya (DSK) və Termoqrammetrik Analiz (TQA) metodları ilə aparılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, tədqiqat obyektlərində bir neçə termik effekt müşahidə edilsə də, bu keçidlər demək olar ki, eyni mexanizm üzrə baş vermişdir. DSK spektrində  $T \sim 100$  °C temperaturlarda baş verən effekt nümunələrin tərkibində asılı halda mövcud olan su kristallarının əmələ gətirdikləri hidrogen qruplarının parçalanaraq nümunələri tərk etməsi ilə izah edilmişdir. Daha yüksək temperaturlarda baş vermiş termik effektlər isə nümunələrin səthində sərbəst halda mövcud olan metal atomlarının oksidləşməsi ilə izah

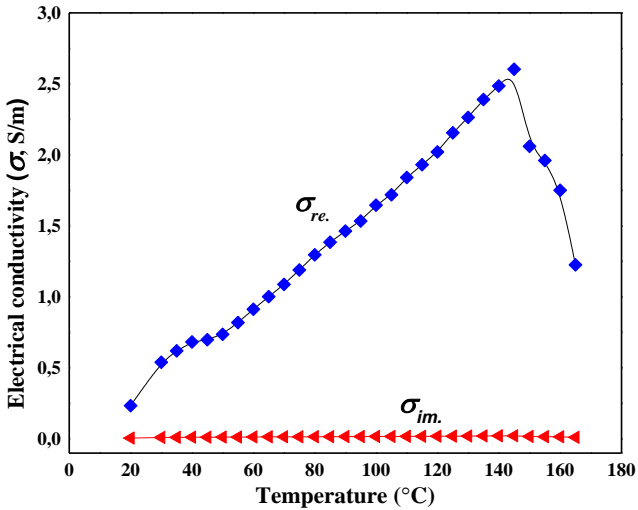
edilmişdir. DSK spektrində müşahidə edilmiş termoeffektlər temperaturun təsiri ilə kütlənin dəyişməsinə uyğun olaraq alınmış TQA spektrində də təsdiq edilmişdir. Fəslin sonunda  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  birləşmələrinin quruluşu və termik xassələrinin tədqiqi zamanı alınmış nəticələr ümumiləşdirilərək təqdim edilmişdir.

**IV fəsil**də  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27, 0.5$ ) birləşmələrinin elektron quruluşu, dielektrik və elektrik xassələri tədqiq edilmişdir.  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  birləşmələrinin elektron quruluşu tədqiq edilməsi zamanı müəyyən edilmişdir ki, bu materiallar yarımkeçirici xassələrə malikdirlər. Nümunələrin tərkibində barium metalının konsentrasiyası artdıqca qadağan olunmuş zonanın eni artır.  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  birləşməsində qadağan olunmuş zonanın eni üçün  $E_g = 0.28$  eV,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün  $E_g = 0.32$  eV və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün isə  $E_g = 0.41$  eV qiymətləri təyin edilmişdir. Bu fərq, lantan və barium elementlərinin elektron konfuqurasiyasında yaranmış fərq ilə izah edilmişdir.

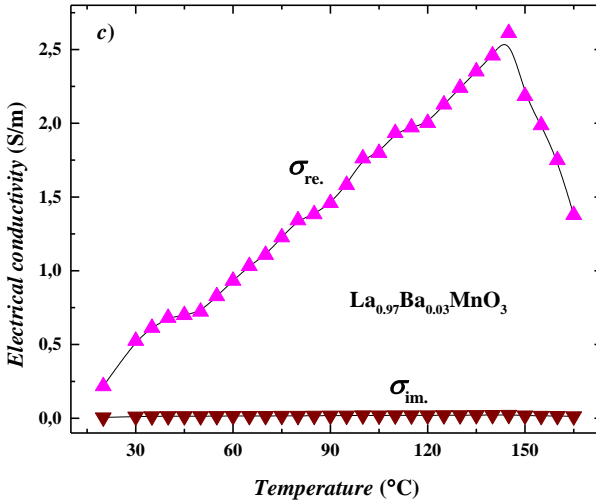
Geniş temperatur və tezlik intervalında  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  yarımkeçiricilərinin dielektrik və elektrik xassələri də tədqiq edilmişdir. Təqqiqatlar  $T = 25\text{-}225$  °C temperatur və  $f = 20\text{-}10^6$  Hz tezlik intervallarında aparılmışdır. Dielektrik xassələrinin tədqiqi zamanı alınmış nəticələrin təhlili göstərmişdir ki, xarici elektrik sahəsinin və yüksək temperaturun təsiri ilə bu birləşmələrdə maraqlı fiziki xassələr müşahidə edilir. Baş verən effektlər tezlik və temperaturun təsiri altında nümunələrdə əlavə yükdaşıyıcıların əmələ gəlməsi ilə izah edilmişdir. Məlumdur ki, yarımkeçirici materiallarda yükdaşıyıcıların yaranması və keçiricilikdə iştirak etməsini öyrənmək üçün ən uyğun metod, həmin birləşmələrdə elektrik keçiriciliyinin öyrənilməsidir. Bu məqsədlə,  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27, 0.5$ ) perovskit birləşmələrində elektrik keçiriciliyi də araşdırılmışdır (şəkil 1-3). Bu birləşmələrinin elektrik keçiriciliklərinin tezlik və temperatur asılılıqları alınmışdır. Asılılıqlardan aşkar edilmişdir ki, hər bir nümunədə özünəməxsus effektlər müşahidə olunmuşdur.



Şəkil 1.  $La_{0.5}Ba_{0.5}MnO_3$  birləşməsinin elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığı.



Şəkil 2.  $La_{0.73}Ba_{0.27}MnO_3$  birləşməsinin elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığı.



**Şəkil 3.  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  birləşməsinin elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığı.**

$\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin elektrik keçiriciliyinin həqiqi hissəsinin tezlik asılılığında aşağı tezliklərdə nisbətən xaotiklik müşahidə olunmuşdur. Müşahidə olunmuş xaotiklik dielektrik xassələrin tədqiqi zamanı alınmış effektlərin izahına anoloji olaraq izah edilə bilər. Lakin elektrik keçiriciliyinin xəyali hissəsinin tezlik asılılığında bir qədər fərqli hal müşahidə olunmuşdur. Belə ki, bu asılılıqda tezliyin  $f < 5 \times 10^5$  Hs intervalında elektrik keçiriciliyi demək olar ki sabit qalmışdır. Lakin tezliyin  $f > 5 \times 10^5$  Hs qiymətindən başlayaraq elektrik keçiriciliyi tezliklə mütənasib olaraq artmışdır. Bu effekti, nisbətən yüksək tezliklərdə keçiricilikdə fəal iştirak etməyə başlayan əlavə yükdaşıyıcıların yaranması mexanizmi ilə izah etmək mümkündür. Xarici elektrik sahəsinin təsiri ilə daha dərin səviyyələrdə olan yükdaşıyıcılar keçiricilik prosesində iştirak etməyə başladıklarına görə, nəticədə elektrik keçiriciliyinin ədədi qiymətində artma müşahidə edilmişdir. Digər tərəfdən elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılıqlarından görüldüyü kimi, bu birləşmələrdə dielektrik nüfuzlunun dəyişmə mexanizmində müşahidə edilmiş hallara oxşarlıqlar müşahidə olunmuşdur. Ona görə də dielektrik xassələrinin izahında

verilmiş qanunauyğunluqlara analogi yanaşmalarla elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılıqlarını da izah etmək mümkündür.

$\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  birləşməsinin elektrik xassələrinin tədqiqi zamanı alınmış nəticələrdə  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşmə üçün alınmış nəticələrdən bir qədər fərqlilik müşahidə edilmişdir. Yüksək temperaturlar oblastında elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılıqlarında xaotiklik müşahidə olunmamışdır. Ümumi yanaşmada deyə bilərik ki, temperaturun  $T = 140\text{ }^\circ\text{C}$  qiyməti ətrafında yarımkeçirici-metal faza keçidi müşahidə olunmuşdur ki, bu da dielektrik xassələrinin tədqiqi zamanı əldə edilmiş nəticələrə uyğun gəlir. Asılılıqlardan görünür ki,  $T < 140\text{ }^\circ\text{C}$  temperatur intervalında nümunə özünü yarımkeçirici kimi aparır. Temperaturun qiymətinin artması ilə nümunədə istilik enerjisi hesabına daha dərin səviyyələrdə yerləşən yükdaşıyıcıların aktivləşməsi nəticəsində elektirik keçiriciliyinin qiymətində artma prosesi müşahidə edilmişdir. Elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığından görüldüyü kimi, temperaturun  $T > 140\text{ }^\circ\text{C}$  qiymətlərində  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  birləşməsi özünü metal kimi aparmışdır. Metalların fiziki xassələrinə uyğun olaraq  $T > 140\text{ }^\circ\text{C}$  intervalında temperaturun artması ilə nümunənin elektrik keçiriciliyi azalmışdır.

Elektrik keçiriciliyinin tezlik və temperatur tədqiqatları analogi olaraq  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün də aparılmışdır. Elektrik keçiriciliyinin tezlik və temperatur asılılıqlarından alınmışdır ki, xarici təsirlər altında elektrik keçiriciliyinin dəyişmə mexanizmi demək olar ki,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  birləşməsində olduğu kimi baş verir. Otaq temperaturunda keçiriciliyin qiyməti  $\sigma = 0.217\text{ S/m}$  qiymətinə malik olmuşdur. Temperaturun qiyməti yüksəldikcə keçiriciliyin qiyməti də yüksəlmiş və  $T = 140\text{ }^\circ\text{C}$  temperaturda  $\sigma = 2.612\text{ S/m}$  qiymətinə malik olmuşdur. Alınmış qiymətlərdən görüldüyü kimi temperaturun verilmiş intervalında keçiriciliyin qiymətində dəfələrlə artma müşahidə edilmişdir. Bu onunla əlaqədardır ki, temperaturun təsiri ilə sistemdə kifayət qədər əlavə yükdaşıyıcılar yaranaraq keçiricilikdə iştirak etmişdir. Elektrik keçiriciliyinin qiymətinin belə artması, metallik xassələrin yaranmasının ilkin əlamətləridir. Temperaturun sonrakı qiymətlərində isə, keçiriciliyin qiymətində əsaslı dərəcədə azalma müşahidə olunmağa başlamışdır.  $T = 165\text{ }^\circ\text{C}$  temperatura qədər alınmış asılılıqdan görüldüyü kimi,  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$



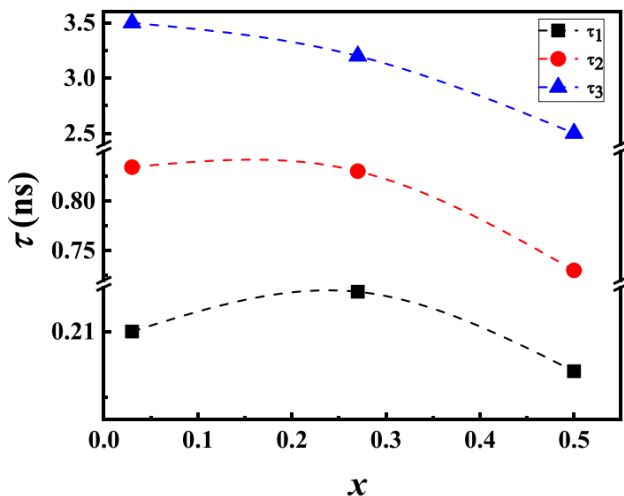
birləşməsində elektrik keçiriciliyinin qiymətində  $\sigma = 1.378$  S/m qədər azalma baş vermişdir. Məlumdur ki, metallarda qadağan olunmuş zona olmur və ona görə də sistemdə mövcud olan yükdaşıyıcılar asanlıqla keçiricilikdə iştirak edə bilirlər. Temperaturun qiyməti artdıqca istilik rəqslərinin amplitudunun artması nəticəsində müqavimətin qiymətində artma müşahidə olunur və ona görə də elektrik keçiriciliyinin qiymətində azalma baş verir. Yarımkəçiricilərdə isə bu prosesin əksi baş verir. Sistemdə qadağan olunmuş zona olduğu üçün, valent sonada olan yükdaşıyıcılar keçiricilikdə iştirak edə bilmirlər. Temperaturun qiyməti artdıqca, istilik enerjisi hesabına bəzi yükdaşıyıcılar sərbəst hala keçərək keçiricilikdə iştirak edə bilirlər. Ona görə də yarımkəçirici materiallarda temperaturun qiyməti artdıqca uyğun olaraq elektrik keçiriciliyinin qiymətində də artma müşahidə olunur.  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  birləşməsində elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığından bu mexanizmlərə uyğun olaraq baş vermiş proseslər aşkar şəkildə görünür və  $T = 140$  °C temperaturda yarımkəçirici-metal faza keçidi baş verir.

$\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27, 0.5$ ) birləşmələrinin elektrik xassələrinin tədqiqi zamanı müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmələr normal şəraitdə və otaq temperaturunda yarımkəçirici xassələrə malik olan materiallardır. Bu birləşmələrdə kation-kation əvəzləmələri zamanı elektrik keçiriciliyində əsaslı dəyişikliklər müşahidə olunmamışdır. Lakin nümunələrin tərkibində olan qarışıqlar keçiriciliyin qiymətinə ciddi şəkildə öz təsirini göstərmişdir. Şəkil 1-də verilmiş asılılıqlardan görünür ki,  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsində asılı halda olan su molekulları  $T > 100^\circ$  C temperaturlarda nümunəni tərk edərkən, elektrik keçiriciliyinin qiymətlərində xaotiklik baş vermişdir. Məlumdur ki, tərkibə daxil olan su molekulları, kristaldakı kationlarla birləşərək hidroksid qrupları əmələ gətirirlər. Ən əsası ondan ibarətdir ki, belə hidroksid qrupları, nümunənin içərisində müəyyən həcm tuturlar. Temperaturun qiyməti artdıqca, istilik enerjisinin təsiri ilə onlar parçalanırlar və su molekulları nümunəni tərk edirlər. Bu proses baş verdiyi zaman strukturda kiçik defektlər formala bilirlər və həmin defektlər yükdaşıyıcıların qismən tutulmasına səbəb olur. Məhz temperaturun həmin qiymətində elektrik keçiriciliyinin qiymətində kəskin şəkildə enmə müşahidə oluna bilir.

Temperaturun sonrakı artması zamanı isə ya əlavə yükdaşıyıcılar hesabına keçiricilik tənzimlənir, ya da defektlər rekombinasiya olunur və nümunəyə xas olan keçiricilik mexanizmi bərpa olur. Belə olduğu halda, nümunələrin elektrik keçiriciliyində müəyyən fluktuasiyalar müşahidə oluna bilər.

Məlumdur ki, temperaturun təsiri ilə nümunənin daxilində olan su molekulları nümunəni tərk edirlər, digər tərəfdən bu proseslər zamanı nümunənin tərkibində yarana bilən defektlər də yüksək temperaturlarda rekombinasiya ola bilərlər. Ona görə də temperaturun təsiri ilə aparılmış tədqiqatlar zamanı alınmış xaosluq ya kifayət qədər az olur, ya da demək olar ki, müşahidə olunmurlar. Lakin xarici elektrik sahəsinin müxtəlif tezliklərində aparılmış tədqiqatlar zamanı temperaturun təsirindən fərqli mənzərə alınır. Nümunənin tərkibindəki radikal və su molekulları nümunələri tərk edə bilmirlər. Ona görə də elektrik keçiriciliyinin tezlik asılılığında alınmış xaosluqlar geniş intervalda davamlı olaraq müşahidə oluna bilərlər.

$\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  perovskit maqnitləri ilk dəfə pozitron spektroskopiyası və Doppler spektroskopiyası metodları ilə tədqiq edilmişdir. Bu kristallarda vakansiyalar və kation boşluqları, defektlər və qəfəs təhrif olunmaları araşdırılmışdır. Birləşmələrin hər biri üçün normal şəraitdə və ayrı-ayrılıqda pozitron spektrləri alınmış və normallaşdırılmışdır. Spektrlərdən alınmışdır ki, bu birləşmələrin hər birində vakansiya tipli qüsurların müşahidə olunmasına baxmayaraq, dəyişikliklər daha az nəzərə çarpır. Bu fərqləri əyani şəkildə təsvir etmək, lantan atomlarının barium atomları ilə qismən əvəz edilməsi zamanı konsentrasiyadan asılı olaraq baş verən dəyişiklikləri göstərmək məqsədi ilə pozitron spektroskopiyası tədqiqatları zamanı alınmış pozitron yaşama müddəti komponentlərinin barium atomlarının konsentrasiyasından asılılıqları qurulmuşdur. Alınmış asılılıqlar şəkil 4 və şəkil 5-də göstərilmişdir.



**Şəkil 4.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27, 0.5$ ) nümunələrində Ba elementinin müxtəlif konsentrasiyaları üçün pozitron yaşama müddəti komponentləri.**

Şəkil 4-dən göründüyü kimi PALS tədqiqatlarının nəticəsi olaraq üç yaşama müddəti komponenti ( $\tau_1$ ,  $\tau_2$ ,  $\tau_3$ ) müşahidə edilmişdir. Alınmış nəticələrdən məlum olmuşdur ki,  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27, 0.5$ ) nümunələrində hər üç yaşama müddəti komponenti barium kationlarının konsentrasiyasının artması və lantan kationlarının konsentrasiyasının azalmasına uyğun olaraq azalırlar. Belə ki, bu birləşmələrdə bariumun konsentrasiyası artdıqca  $\tau_1$  parametrinin qiyməti 0.210 nsan-dən 0.201 nsan-ə qədər,  $\tau_2$  parametrinin qiyməti 0.834 nsan-dən 0.730 nsan-ə qədər,  $\tau_3$  parametrinin qiyməti isə 3.5 nsan-dən 2.5 ns-ə qədər azalmışdır.  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  və  $\tau_3$  parametrlərinin hər biri nümunədə pozitronun yaşama müddətini xarakterizə etsələr də, onların hər biri özündə müəyyən fiziki xüsusiyyətlər daşıyır və mühüm elmi əhəmiyyətə malikdir. Nisbi intensivliyi 72-90% olan və 201-219 psan qiymətlərinə malik olan qısa yaşama müddəti komponenti  $\tau_1$  pozitronların sərbəst həcmərdə məhv olması ilə əlaqədardır.  $\tau_2$  yaşama müddəti komponenti isə boşluq tipli qüsurlarda və ya nümunədə bəzi azalmış elektron sıxlığı bölgələrində pozitronların qismən tutulması ilə əlaqədar olan komponentdir.  $\tau_2$ -nin bu cür

azalması prosesi ya qüsurların ölçüsünün azalması ilə, ya da elektronun daha kiçik bir atomun səthinə daxil olması ilə əlaqədar baş verən proseslə izah oluna bilər. Uzun yaşama müddəti komponenti  $\tau_3$  parametrinin qiymətinin 2.5-3.5 nsan arasında dəyişməsi isə qüsurlarda və ya sərbəst həcmdə pozitronun əmələ gəlməsi ilə əlaqədardır.

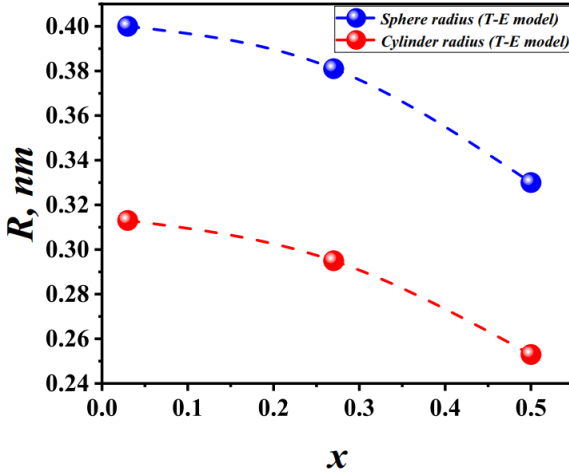
Spektrlərin analiz edilməsi zamanı müəyyən edilmişdir ki,  $\tau_2$  və  $\tau_3$  parametrlərinə uyğun gələn intensivliklərin qiymətləri azalır. Bu azalma nümunələri əmələ gətirən kristallitlərin sərhədlərində və böyük klaster boşluqlarında  $Ba^{2+}$  ionlarının toplanması ilə əlaqədar ola bilər. Pozitronların  $Ba^{2+}$ -dan annihilyasiya olması nəticəsində nöqtəvi defektlər və boşluqlar pozitronların tutulması üçün arzu olunan yerə çevrilirlər.  $Ba^{2+}$  ionlarının konsentrasiyasının artması zamanı üç pozitron annihilyasiya yaşama müddəti komponentinin ( $\tau_1$ ,  $\tau_2$ ,  $\tau_3$ ) qiymətlərinin azalması materialın strukturundakı defektlərin və elektron xüsusiyyətlərinin dəyişikliklərinin göstəricisidir.  $\tau_3$  uzun yaşama müddəti komponentinin 3.5-2.5 nsan intervalında və  $I_3$  intensivliyinin isə 2.9-2.6 % arasında dəyişməsi pozitronların əsasən nümunənin səthində annihilyasiya olunmasının göstəricisidir və nümunələrdə kristallararası bölgələrdə ortopositron (o-Ps) əmələ gəlməsinin nəticəsidir. Konsentrasiyanın və kristallik ölçülərinin artması səbəbindən  $Ba^{2+}$  ionları  $La^{3+}$  vakansiyalarını tuturlar və bunun ardınca kristallitlərin sərhədlərində pozitron tutulmalarının da miqdarı artmağa başlayır.

Positron spektroskopiyası metodu ilə aparılmış tədqiqatlar zamanı alınmış  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  və  $\tau_3$  parametrlərinə əsasən nümunələrdə pozitronların orta yaşama müddəti ( $\tau_{orta}$ ) hesablanmışdır.  $La_{1-x}Ba_xMnO_3$  ( $x = 0.03, 0.27, 0.5$ ) nümunələrində pozitronların orta yaşama müddəti komponentinin qiymətləri uyğun olaraq  $\tau_{orta} = 0.363, 0.354, 0.312$  nsan təyin edilmişdir.

Spektrlərin təhlilindən görünür ki,  $La_{1-x}Ba_xMnO_3$  ( $x = 0.03, 0.27, 0.5$ ) sisteminə daxil olan birləşmələrdə barium atomlarının konsentrasiyası artdıqca pozitronların orta yaşama müddətini xarakterizə edən  $\tau_{orta}$  parametrində ciddi şəkildə azalma müşahidə olunur. Bu effekt onun göstəricisidir ki, kristallarda La atomlarının konsentrasiyasının azalması və Ba atomlarının artması zamanı birləşmələrin daxilində elektron sıxlığının dəyişməsi baş verir. Rentgen difraksi-

yası metodu ilə aparılmış quruluş tədqiqatları zamanı alınmış nəticələrdən məlumdur ki, barium atomlarının konsentrasiyası artdıqca qəfəs parametrlərinin qiymətləri də artır. Bu effekt, barium atomlarının ion radiusunun lantan atomlarının ion radiusundan daha böyük olması ilə izah olunur. Pozitron spektroskopiyası ilə aparılmış tədqiqatlardan alınmış nəticələrdən görünür ki, ion radiusları arasındakı fərq, yalnız quruluşun formalaşmasında əsas rol oynayan qəfəs parametrlərinə deyil, həm də nümunələrin elektron xassələrinə öz təsirini göstərir. Nümunələrdə pozitronun yaşama müddətinin artmasını da eyni mexanizm üzrə izah etmək mümkündür. Nümunələrin tərkibində barium atomlarının konsentrasiyası artdıqca pozitronun yaşama müddətinin qiymətinin azalması, nümunələrdə elektron sıxlığının artması ilə izah oluna bilər. Belə ki, barium atomlarının konsentrasiyası artdıqca kristallarda elektron sıxlığı da artmışdır və nəticədə pozitronun yaşama müddətində azalma baş verir. Daha dəqiq desək, orta pozitron yaşama müddətinin azalması pozitronun annihilasiya olduğu yerlərdə elektron sıxlığının artması ilə əlaqədardır.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  sistemində Ba atomlarının konsentrasiyasının  $x = 0.5$  olan nümunə üçün  $\tau_{\text{orta}}$  maksimum azalma müşahidə edilmişdir. Ona görə də, konsentrasiyanın bu qiyməti,  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  sistemində elektron sıxlığının ən yüksək olduğu optimal konsentrasiya hesab oluna bilər.

Pozitron spektroskopiyası metodu ilə həm də nümunələrdə mövcud olan defektlərin konsentrasiyasını və ölçülərini müəyyən etmək mümkündür. Məlumdur ki, kristallarda müxtəlif formalı defektlər mövcud ola bilər. Həcmi defektlər həm sferik formada, həm də silindrik formada mövcud olurlar.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27, 0.5$ ) birləşmələrində məsələlər arasındakı boşluqların Tao-Eldrup modelinə əsaslanan həm sferik, həm də silindrik defektlərin radiusları Psc\_v12 program təminatı vasitəsilə hesablanmışdır. Defektlərin radiuslarının nümunələrdəki barium atomlarının konsentrasiyasından asılılıqları şəkil 5-də verilmişdir.



**Şəkil 5.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27, 0.5$ ) birləşmələrində Ba atomlarının müxtəlif konsentrasiyaları üçün məsamələr arası boşluqların radiuslarının ölçüləri.**

Tao-Eldrup modelinə görə, o-Ps sferik və silindirik radiusu materialda sərbəst həcmli boşluqların ölçüsü və paylanması ilə müəyyən edilir. Bu boşluqlar o-P-lər üçün tələ rolunu oynayır. Şəkil 5-dən görüldüyü kimi  $x$ -in artması ilə həcmi boşluqların həm sferik həm də silindirik radiusları kiçilmişdir. Belə ki, sferik radius 0.400 nm-dən, 0.381 nm və 0.330 nm-a qədər kiçilir, silindirik radius isə 0.313 nm-dən, 0.295 nm və 0.253 nm-a qədər kiçilmişdir. Buradan belə nəticəyə gəlmək mümkündür ki, nümunələrin tərkibində barium atomlarının konsentrasiyası artdıqca, qüsurların ölçüləri ciddi şəkildə azalmışdır. Pozitron spektroskopiyası metodu ilə həm də defektlərin konsentrasiyasını təyin etmək mümkündür. Tədqiqatlar zamanı alınmış intensivliklərin konsentrasiya asılılıqları, nümunələrdə barium atomlarının konsentrasiyası artdıqca defektlərin konsentrasiyasını müəyyən etməyə imkan verir.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  kristallarında Ba atomlarının konsentrasiyası artdıqca boşluq tipli qüsurların sayı artmışdır. Bunu  $I_1$  nisbi intensivliyinin artması ilə göstərmək olar. Daha çox boşluqların olması o-P-lərin tutulmasını gücləndirmiş, yaşama müddətini isə azaltmışdır. Beləliklə, o-Ps sferik radiusu azalmışdır. Bunun səbəbi, o-P-lərin bu əlavə boşluqlarla qarşılaşma və tələyə

düşmə şansının daha yüksək olmasıdır. Deməli,  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  sistemi birləşmələrində  $x$  konsentrasiyası artdıqca o-Ps sferik və silindrik radiusu azalmışdır. Məsələn,  $x = 0.03$  olduqda, kristal qəfəsdə daha çox boşluqlar olmuşdur, nəticədə nisbətən daha böyük o-Ps sferik və silindrik radiusları yaranmışdır. Qeyd etmək vacibdir ki, bu izahat Tao-Eldrup modelinin fərziyyələrinə əsaslanır və tədqiqat nəticələrinin analiz edilməsi zamanı yalnız qüsurların və boş yerlərin o-Ps davranışına təsiri nəzərə alınmışdır.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  sistemində  $x$ -in artması ilə o-Ps sferik radiusunda müşahidə edilmiş azalmaya qəfəs quruluşunun qismən təhrifi və elektron quruluş dəyişiklikləri kimi digər amillərin də təsir göstərməsi mümkündür.

Pozitron yaşama müddəti spektroskopiyası metodu ilə  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  birləşmələrinin tədqiqi zamanı müəyyən edilmişdir ki, kation-kation əvəzləmələri bu birləşmələrdə elektron proseslərə kifayət qədər ciddi təsir göstərir. Belə ki, ilk növbədə bu birləşmələrdə elektron sıxlığı dəyişir. Məlumdur ki, bu birləşmələrdə kation-kation əvəzləmələri zamanı həm də qadağan olunmuş zonanın enində ciddi dəyişikliklər baş vermişdir.  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  birləşməsində qadağan olunmuş zonanın eni  $E_g = 0.28$  eV,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  birləşməsində  $E_g = 0.32$  eV,  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsində isə  $E_g = 0.41$  eV-dur. Göründüyü kimi qadağan olunmuş zonanın enində artma baş verdikcə həm keçirici zonada, həm də valent zonada elektron sıxlığı yaranmışdır ki, bu da pozitron yaşama müddəti metodu ilə alınmış nəticələrlə təsdiq olunmuşdur. Alınmış nəticələrin digər metodlarla alınmış nəticələrlə müqayisəsi zamanı görünür ki, lantan atomlarının qismən barium atomları ilə əvəz edilməsi zamanı elektron xassələrdə əsaslı dəyişikliklər yaradır. Barium atomlarının konsentrasiyası artdıqca həm elektron sıxlığı, həm də qadağan olunmuş zonanın enində ciddi şəkildə dəyişikliklər yaranır.

## NƏTİCƏ

1.  $\text{LaMnO}_3$  perovskit manqanitində La atomlarının Ba atomları ilə qismən əvəz edilməsi ilə sintez edilmiş  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) birləşmələrinin kristal quruluşunun öyrənilməsi zamanı

müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmələr birfazlı halda alınır və onların kristal quruluşu kubik simmetriyalı Pm-3m ideal perovskit quruluşu uyğun gəlir. Ba atomlarının konsentrasiyası artdıqca qəfəs parametrlərinin qiymətlərində artma müşahidə edilmişdir ki, bu da lantan və barium elementlərinin ion radiusları arasındakı fərq ilə izah edilmişdir.

2.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) sistemi birləşmələrinin elektron quruluşu tədqiq edilmiş və müəyyən edilmişdir ki, kristallarda barium atomlarının konsentrasiyası artdıqca qadağan olunmuş zonanın eni artır.  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  birləşməsində qadağan olunmuş zonanın eni üçün  $E_g = 0.28$  eV,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün  $E_g = 0.32$  eV və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün isə  $E_g = 0.41$  eV qiymətləri təyin edilmişdir.

3.  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  perovskit birləşmələrinin dielektik itkisinin, dielektrik nüfuzluğunun və elektrik keçiriciliyinin temperatur ( $T = 25-225$  °C) və tezlik ( $f = 20-10^6$  Hz) asılılıqlarının tədqiqi zamanı müəyyən edilmişdir ki, temperaturun və tezliyin qiyməti artdıqca bu birləşmələrdə elektrik keçiriciliyinin qiyməti artır. Bu effekt, kristallarda istilik enerjisinin və ya xarici elektrik sahəsinin təsiri ilə daha dərin səviyyələrdə olan yükdaşıyıcıların sərbəst hala keçməsi ilə izah edilmişdir.

4.  $T = 25-225$  °C yüksək temperatur intervalında  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  perovskit birləşmələrində elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığına əsasən  $T \sim 140$  °C temperaturda yarımkeçirici-metal faza keçidi aşkar edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, istilik enerjisi hesabına dərin səviyyələrdə olan yükdaşıyıcılar keçiricilikdə iştirak etməsi nəticəsində bu kristallarda metallik xassələr yaranır.

5.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) maqnitlərinin pozitron annihilyasiya spektroskopiyası ilə tədqiqi zamanı müəyyən edilmişdir ki, bu kristallarda barium atomlarının konsentrasiyasının artması ilə məsələlər arası boşluqların radiuslarının qiymətlərində əsaslı dəyişikliklər müşahidə olunur. 0D (vakansiyalar və kation boşluqları) və 3D (qəfəs təhrifləri və məsələlər) defektlərinin tədqiqi zamanı müəyyən edilmişdir ki,  $x = 0.03, 0.27, 0.5$  konsentrasiya intervalında boşluqların sferik radiusunun  $R = 0.4$  nm,  $0.381$  nm və  $0.33$  nm



qiymətlərinə uyğun olaraq, silindirik radiusunun isə  $R = 0.313$  nm,  $0.295$  nm və  $0.253$  nm qiymətlərinə uyğun olaraq kiçilir.

6.  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  ( $x = 0.03, 0.27$  və  $0.5$ ) sistemi birləşmələrində pozitron yaşama müddəti spektroskopiyası metodu ilə aparılmış tədqiqatlar zamanı müəyyən edilmişdir ki, kristalların tərkibində barium atomlarının konsentrasiyası artdıqca pozitronların yaşama müddəti kiçilir. Müəyyən edilmişdir ki, bu effekt barium atomlarının konsentrasiyası artdıqca nümunələrin tərkibində elektron sıxlığının artmasına uyğun gəlir.

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

1. Nabiyeva, A.X. Thermal properties of the  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  at high temperature, International Conference “Condensed Matter Research at the IBR-2”, Dubna, Russia, April 25-29, 2022, p.188.
2. Nəbiyeva, A.X., Cabarov, S.H., Hüseynov, H.C. Yüksək Temperaturlarda  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  birləşməsinin termoqravimetrik analizi, Azərbaycan xalqının ümummilli lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 99-cu ildönümünə həsr olunmuş tələbə və gənc tədqiqatçıların “Gənclər və elmi innovasiyalar” mövzusunda respublika elmi-texniki konfransı, 4-5 may 2022-ci il, Bakı, Azərbaycan.
3. Jabarov, S.H., Nabiyeva, A.Kh., Trukhanov, S.V., Trukhanov, A.V, Mirzayev, M.N. Thermal properties of  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  compounds at high temperatures, New Materials, Compounds and Applications, 7, 3, P.149-155, 2023.
4. Набиева, А.Х. Структурное исследование соединений  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ , Международная конференция «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах», 10-15 сентября 2023 г., с.222-223, Махачкала, Россия.
5. Набиева, А.Х., Джабаров, С.Г. Электрические свойства соединения  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  при высоких температурах, II-международная конференция «Фундаментальные и прикладные проблемы физики полупроводников, микро- и

нанoelektroniki», 27-28 oktyabr 2023 g., s.36-38, Tashkent, Uzbekistan.

6. Jabarov, S.H., Nabyeva, A.Kh., Trukhanov, A.V., Trukhanov, S.V., Huseynov, H.J., Aliyev, Y.I. Dielectric and electrical properties of the  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  compound at high temperatures, SOCAR Proceedings, 4, P.171-175, 2023.
7. Nəbiyeva, A.X.  $\text{La}_{0.73}\text{Ba}_{0.27}\text{MnO}_3$  perovskit birləşməsinin elektrik xassələri, Energetika ixtisasları üzrə kadr hazırlığının aktual məsələləri III Respublika Elmi Konfransı, 17-18 noyabr 2023-cü il, s.118-119, Sumqayıt, Azərbaycan.
8. Nabyeva, A.Kh., Jabarov, S.H., Trukhanov, S.V., Trukhanov, A.V., Ismayilova, N.A. XRD and SEM analyses of structural properties of  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  solid solutions, International Journal of Modern Physics B, 38, P.2450327, 2024.
9. Nabyeva, A.Kh., Jabarov, S.H., Ismayilova N.A., Huseynov, H.J. First principles study of electron structure of  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  crystals, Ferroelectrics Letters Section, 51, P.9-13, 2024.
10. Jabarov, S.H., Nabyeva, A.Kh., Huseynov, E. Mımanova, G.T., Trukhanov A.V., Trukhanov S.V. Dielectric and electrical properties of  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  and  $\text{La}_{0.97}\text{Ba}_{0.03}\text{MnO}_3$  perovskites, Journal of Porous Materials, 31, P.1811-1816, 2024.
11. Jabarov, S.H., Nabyeva, A.Kh., Samadov, S.F., Abiyev, A.S., Sidorin, A.A., Trung, N.V.M., Orlov, O.S., Mauey, B., Trukhanov, S.V., Trukhanov, A.V., Mirzayev, M.N. Study defects formation mechanism in  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  perovskite manganite by positron annihilation lifetime and Doppler broadening spectroscopy, Solid State Ionics, 414, P.116640, 2024.
12. Nabyeva, A.Kh., Jabarov, S.H., Huseynov, H.J., Aliyev, Y.I., Samadov, S.F. III международная научная конференция «Современные тенденции развития физики полупроводников: достижения, проблемы и перспективы», 26-27 сентября 2024 г., Ташкент, Узбекистан.

Dissertasiyanın müdafiəsi 15 yanvar 2025-ci il tarixində saat 09:30 Azərbaycan Respublikasının Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya şurasının iclasında keçiriləcək.

Ünvan: Bakı şəh., H. Cavid pr. 131, Az-1073.  
e-mail: [director@physics.science.az](mailto:director@physics.science.az)

Dissertasiya ilə Azərbaycan Respublikasının Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunun kitabxanasında tanış olmaq mümkündür.

Dissertasiya və avtoreferatın elektron versiyaları Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunun rəsmi internet saytında yerləşdirilmişdir.

Avtoreferat 12 dekabr 2024-cü il tarixində zəruri ünvanlara göndərilmişdir.

Çapa imzalanıb: 09.12.2024

Kağızın formatı: A5

Həcm: 37232

Tiraj: 100