

**AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASI
RADIASIYA PROBLEMLƏRİ İNSTİTUTU**

Əlyazması hüququnda

ELMAR BAĞIR OĞLU ƏSGƏROV

**ŞÜALANMA, TEMPERATUR VƏ TƏZYİQİN TLFES₂(SE₂)
ANTİFERROMAQNİTLƏRİNİN KRİSTAL VƏ MAQNİT
QURULUŞUNA TƏSİRİ**

2225.01 – Radiasiya materialşünashğı

Fizika üzrə fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi almaq üçün təqdim edilən
dissertasiyanın

AFTOREFERATI

BAKI – 2016

İş, Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Radiasiya Problemləri İnstitutunda yerinə yetirilmişdir.

Elmi rəhbərlər:

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru

C.İ. İsmayılov

Fizika üzrə fəlsəfə doktoru, dosent

R.N. Mehdiyeva

Rəsmi opponentlər:

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru,
professor

R.S. Mədətov

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru,
professor

Z.A. Cahangirli

Aparıcı təşkilat: Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri İnstitutu, “Yarımkeçiricilər fizikası şöbəsi”

Müdəfiə 25 noyabr 2016-ci il saat « 12⁰⁰ »-da AMEA Radiasiya Problemləri İnstitutu nəzdində fəaliyyət göstərən D01.221 Dissertasiya şurasının iclasında keçiriləcək.

Ünvan: AZ-1143, Bakı ş.B Vəhabzadə küçəsi 9.

tel.: (99412) 539 – 33 – 91

faks: (99412) 539 – 83 – 18

Dissertasiya ilə AMEA Radiasiya Problemləri İnstitutunun kitabxanasında tanış olmaq olar.

Avtoreferat göndərilmişdir: « 24 » __oktyabr__ 2016-cı il.

D01.221 Dissertasiya Şurasının Elmi katibi, kimya elmləri doktoru

T.N. Ağayev

İşin ümumi səciyyəvi xarakteristikası

Mövzunun aktuallığı. Son illər yarımkeçirici materiallarda quruluş qüsurlarının yaranması, keçiricilik, həmçinin onların xassələrinə müxtəlif növ şüalanmaların təsirinin öyrənilməsi ilə bağlı çox saylı tədqiqatlar aparılır. Yüksək radiasiya şəraitində işləməyə qadir olan yarımkeçiricilərə maraq, onların kosmik elektronikada, sürətləndiricilərdə və nüvə enerji qurğularında istifadə olunması ilə bağlıdır. Eyni zamanda informasiya sistemləri və onlar üçün tələb edilən yeni nəsil qurğuların yaradılması, mikro və opto-elektronikanın inkişafı, qeyri-ənənəvi, ekoloji təmiz enerji mənbələrinin yaradılması, müxtəlif fiziki-kimyəvi xassələrə kompleks şəkildə malik olan yeni materialların məqsədyönlü axtarışını tələb edir. Çoxkomponentli birləşmələrin maqnit alt sistemlərinin halından və tərkibindən asılı olan fiziki-kimyəvi, maqnitooptik, elektrofiziki, yarımkeçirici və digər bu kimi xassələrinin müxtəlifliyi böyük marağa səbəb olur. Bu maraq maqnit xassələrinin dəyişilməsilə elektrik və optik parametrlərin idarə edilməsi və ya əksinə, prinsipcə yeni növ qurğuların yaradılması baxımından mühüm əhəmiyyət daşıyır. Müxtəlif kristalloqrafik istiqamətlər üzrə fiziki xassələri güclü anizotropluğa malik laylı və zəncirvari quruluşlu yarımkeçirici kristallar arasında $TlMeX_2$ (Me - 3d metal, X - S, Se, Te) tipli kimyəvi birləşmələr xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Aparılmış tədqiqatların nəticələri göstərir ki, belə laylı və zəncirvari quruluşlu monokristallar, fotoelektrik çeviriciləri, spektr analizatorları, tenzorezistor və rentgen detektorlarının hazırlanması üçün yararlı sayılır. Bu birləşmələr həmçinin nanometr miqyaslı quruluş elementləri əsasında qurğularının yaradılmasında yeni imkanlar yaradır.

İş AMEA Radiasiya Problemləri İnstitutunun elmi-tədqiqat işləri planına uyğun olaraq yerinə yetirilmişdir.

Dissertasiyanın məqsədi: Dissertasiya işinin məqsədi, şüalanmanın $TlFeS_2$ və $TlFeSe_2$ kristallarında radiasiya qüsurlarının yaranmasına, kristal və maqnit quruluş dəyişikliyinə təsirinin təyini, temperatur və təzyiqin təsiri nəticəsində bu birləşmələrdə maqnit

nizamlılığını mexanizminin müəyyənləşdirilməsi, həmçinin TlFeS_2 və TlFeSe_2 tərkibli birləşmələrin nanoölçülü amorf təbəqələrinin kristallaşmasının kinetik parametrlərinin təyini.

Nümunələr və tədqiqat metodları: Tədqiqat obyektləri - maqnit xassələrə malik TlFeS_2 və TlFeSe_2 yarımkeçirici antiferromaqnitləridir.

Nümunələrin rentgenoqrafik analizi DRON-3M (NFL, BNTİ, Dubna, Rusiya) və X-ray Difraktometr (XRD) D2 PHASER (AMEA-nın Qeyri-üzvi Kimya və Kataliz İnstitutu) rentgen qurğusunda yerinə yetirilmişdir. Differensial termik analiz, Radiasiya problemləri institutunda HFFHH-də ölçülmüşdür. 10-300 K temperaturalarda və 0-5 GPa təzyiqlərdə tədqiq olunan birləşmələrdə baş verən quruluş çevrilmələri və faza keçidləri İBR-2M impuls reaktorunda yerləşən DN-2, DN-6 və DN-12 difraktometrlərində (NFL, BNTİ, Dubna, Rusiya) TOF - uçuş müddəti metodunun köməyi ilə ölçülmüşdür. Alınmış təcrübi nəticələr Ritveld metodu ilə analiz edilmişdir. Bunun üçün VMRIA və FullProf proqramlarından istifadə olunmuşdur. Həmçinin, nümunələr 167 MeV enerjili Xe^{+26} ionları ilə $0.5 \cdot 10^{13}$, $1.0 \cdot 10^{13}$, $2.0 \cdot 10^{13}$ ion/sm² şüalanma dozalarında, yüksək vakuum ($<7 \cdot 10^{-6}$ Torr) və otaq temperaturunda IC-100 sürətləndiricisində (LNF JINR, Dubna) şüalandırılmışdır. SRIM2008 proqramının köməyi ilə Xe^{+26} ionlarının getdiyi yolun dərinliyi boyunca ion itkisi enerjisi $(dE/dx)_{ion}$ və radiasiya defektlərinin sayı dpa (displacement per atom) alınmışdır. Şüalanmadan əvvəl və sonra səthin morfoloqiyasının dəyişməsinin tədqiqi SOLVER-NEXT (Milli Aviasiya Akademiyasında) atom-güc mikroskopunda yerinə yetirilmişdir. Yüksək enerjili elektron difraksiyası üsulu ilə difraksiya mənzərələrinin diskret çəkilişi və EMR-110 K elektronografiya tətbiqən kinematik elektronografiya metodu ilə Tl-Fe-S(Se) sistemlərində yaranan nazik təbəqələrdə fazaəmələgəlmə və faza keçidləri tədqiq edilmişdir.

Dissertasiyanın elmi yeniliyi: Tədqiqat obyektləri $0.5 \cdot 10^{13}$, $1.0 \cdot 10^{13}$, $2.0 \cdot 10^{13}$ ion/sm² dozalarda 167 MeV enerjili Xe^{+26} ionları ilə şüalandırılaraq, nümunələrin radiasiyaya davamlılığı, şüalanma nəticəsində defektəmələgəlmə prosesləri öyrənilmişdir. TlFeS_2

tərkibli nümunələrinin şüalandırmadan öncə və şüalandırmadan sonra nano miqyaslı səthinin morfologiyası tədqiq edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, 167 MeV enerjili ionlarla şüalandırıldıqda, nümunələrin qalınlığı boyunca ilkin radiasiya qusurlarının paylanması bircinsli deyildir. $(dE/dx)_{ion}$ ionlaşdırıcı profil itkiləri və Xe ionlarının qaçış məsafəsi boyu dpa vahidlərində SRIM 2008 proqramının köməyi ilə alınmışdır. Nəzəri hesablamalar əsasında alınmış nəticələr göstərir ki, 167 MeV enerjili Xe^{+26} ionlarının qaçış məsafəsi $R = 14.69$ mkm. Atom güc mikroskopundan istifadə edərək, alınan səthin kəmiyyət asılılıqları histoqramlarına əsasən, səthin bölünmə periodikliyi strukturu, maksimum dəyəri Z_{ij} , orta kvadratik kələkötürlüyü, asimetriya əmsalı və piklərin itiliyini xarakterizə edən basıqlıq əmsalı müxtəlif dozalarda hesablanmışdır. Amroflaşmanın başlama dozası təxminən $0.32 \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-2}$ qiymətləndirilmişdir. $2 \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-2}$ dozada Qaus formalı maksimum analiz edilərək, səthi xarakterizə edən əmsallar (asimetriya əmsalı və kələkötürlülük əmsalı) hesablanmış və dozanın artması ilə səthdə “hamarlaşma” prosesinin yaxşılaşdığı göstərilmişdir.

İlk dəfə olaraq göstərilmişdir ki, $TiFeS_2$ və $TiFeSe_2$ birləşmələrində faza keçidi zamanı monoklinlik bucağı β və elementar özlərin qiymətləri kəskin dəyişikliyə uğrayır. Temperatur yüksəldikcə $TiFeS_2$ -də monoklinlik bucağının qiymətində azalma, $TiFeSe_2$ birləşməsində isə əks effekt baş verir, temperatur yüksəldikcə β bucağının qiyməti artır. Təyin olunmuşdur ki, temperatur azaldıqca hər iki birləşmədə Fe-Fe məsafəsi azalır və faza keçidi nöqtəsində minimal 2.501 \AA qiymətini alır və antiferromaqnit fazada demək olar ki, dəyişməz qalır. Həmçinin $TiFeS_2$ və $TiFeSe_2$ birləşmələrinin antiferromaqnit fazaları üçün Neel temperaturlarının qiyməti təyin edilərək hər iki fazada temperaturdan genişlənmə əmsalları, o cümlədən effektiv maqnit momentləri hesablanaraq maqnit momentlərinin orientasiyası və maqnit qəfəsi modelləşdirilmişdir. Həmçinin neytron difraksiya metodu ilə təzyiq altında $TiFeS_2(Se_2)$ kristallarının elementar özlə parametrlərinin (a , b , c) xətti sıxılmaları və elementar qəfəsin nisbi həcmnin təzyiqdən asılılıq xarakteristikası təyin edilmişdir.

Tl-Fe-S(Se) sistemlərinin nanoqalınlıqlı təbəqələrində fazaların əmələgəlmə qanunauyğunluğu aydınlaşdırılmış, həm adi şəraitdə, həm də 3000 V/sm intensivlikli xarici elektrik sahəsinin təsiri altında alınmış amorf təbəqələrin kristallaşmalarının kinetik parametrləri təyin olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, elektrik sahəsi altında kondensə edilmiş təbəqələrin faza çevrilmələri daha aşağı temperaturlarda baş verir.

İşin elmi və praktiki əhəmiyyəti Kvazibirözlü antiferromaqnitlər olan TlFeS_2 və TlFeSe_2 birləşmələrində maqnit nizamlılığı mexanizminin təyin edilməsindən və antiferromaqnit-paramaqnit tipli maqnit faza keçidlərinin müəyyən edilməsindən ibarətdir. $\text{TlFeS}_2(\text{Se}_2)$ birləşmələrinin xətti genişlənmələrinin temperatur və təzyiqdən xətti sıxılma əmsalları təyin olunmuşdur. TlFeS_2 birləşməsi $0.5 \cdot 10^{13}$, $1.0 \cdot 10^{13}$, $2.0 \cdot 10^{13}$ ion/sm² dozalarda 167 MeV enerjili Xe^{+26} ionları ilə şüalandırılaraq, nümunələrin radiasiyaya davamlılığı, şüalanmadan sonra səthdə baş verən dəyişikliklərin mexanizmi öyrənilmiş, amroflaşmanın başlama dozası təxminən $0.32 \cdot 10^{13}$ sm⁻² qiymətləndirilmişdir. Bütün dozalarda səthi xarakterizə edən əmsallar hesablanmış və dozanın artması ilə səthdə “hamarlaşma” prosesinin yaxşılaşdığı, o cümlədən baxılan doza intervalında $(0 - 2) \cdot 10^{13}$ sm⁻² bütün parametrlərin dozadan asılılıq əyriləri eksponensial qanunauyğunluqla dəyişməsi göstərilmişdir. Tl-Fe-S(Se) sistemlərində fazaəmələgəlmə proseslərinin texnoloji xüsusiyyətləri təyin olunmuş və $\text{TlFeS}_2(\text{Se}_2)$ tərkibli amorf təbəqələrin kristallaşmalarının kinetik parametrləri müəyyən edilmişdir.

Müdafiəyə çıxarılan müddəalar:

1. Şüalanma dozasının artması ilə kristalların kristollaqrafik parametrlərinin- a , b , c , β və kristal qəfəsin həcmi V böyüməsi. Treklərin qarşılıqlı bağlanma dozasının təxminən $0.32 \cdot 10^{13}$ sm⁻² qiymətindən sonra baş verməsi və dozanın sonuncu $2 \cdot 10^{13}$ sm⁻² qiymətində histogramda bir Qaus formalı maksimumun yaranması. Səthin orta kvadratik kələkötürlülük əmsalının azalması, o cümlədən asimetriya əmsalının müsbət qiymətə çatması və bu

halda səthin daha “hamar” vəziyyətdə olması. Baxılan doza intervalında ($0 - 2 \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-2}$) qəfəs və səth parametrlərinin eksponensial $A(\phi) = A_1[1 - \exp(-\sigma\phi)] + A_0$ qanunauyğunluqla dəyişməsi .

2. Otaq temperaturundan başlayaraq 12 K temperatura kimi hər iki birləşmə üçün temperaturun aşağı düşməsilə Fe-Fe atomlararası məsafələrinin azalaraq, faza keçidi nöqtəsində $l_{\text{Fe-Fe}} \sim 2.501(3) \text{ \AA}$ qiymətini alması və β monaklin bucağının faza keçidi nöqtələrində (200 K və 290 K) sıcrayışla dəyişilməsi. TlFeS₂-də temperaturdan asılı olaraq həcmnin dəyişilməsi TlFeSe₂ birləşməsinə nisbətən daha kəskin baş verməsi. TlFeS₂ və TlFeSe₂ birləşmələrinin istilikdən genişlənmə əmsalları qiymətlərinin nisbət artımı faza keçidinə qədər və faza keçidindən sonra, uyğun olaraq 4.2(2) və 1.3(8) dəfə təşkil etməsi.
3. Təzyiqin yüksəlməsilə TlFeSe₂ kristalının monoklinik β bucağı 118.2°-dən dəyişərək 117.3°-dək azalması, TlFeS₂-nin monoklinik bucağının isə $\beta \sim 116.8^\circ$ dəyişilməz qalması. Elementar özək parametrlərinin (a, b, c) xətti sıxılmalarının təyini və elementar qəfəsin nisbi həcmnin təzyiqdən asılılıq interpolyasiyasının Berç – Murnaqaqa tənliyinin üçüncü qaydasına tabe olması.
4. Tl-Fe-S və Tl-Fe-Se sistemlərində formalaşan nazik təbəqəli nümunələrin faza tərkibinin təyini. Elektrik sahəsinin təsiri altında və adi şəraitdə alınan TlFeS₂(Se₂) amorf təbəqələrin kristallaşmasının kinetik parametrlərinin müəyyənəndirilməsi.

İşin aprobasiyası. Dissertasiyada alınan təcrübi tədqiqatların nəticələri aşağıdakı Respublika və Beynəlxalq konfranslarda məruzə edilmişdir.

1. Симпозиум «Среды со структурным и магнитным упорядочением» Multiferroics-4 (сентябрь 2013 г, Ростов-на-Дону, Россия).

2. Международная научная школа “Современная нейтронография” (октябрь 2013, г. Дубна, Россия).
3. II Международная конференция многомасштабное моделирование структур, строение вещества, наноматериалы и нанотехнологии MMSNII (ноябрь 2013 г., Тула, Россия).
4. “Radiasiya tədqiqatları və onun praktiki aspektləri” akademik Mahmud Kərimovun 65 illik yubileyinə həsr olunmuş VII konfrans (noyabr 2013 -cü il, Bakı, Azərbaycan).
5. 48-я Школа ФГБУ «ПИЯФ» по ФКС, (март 2014 г, Санкт-Петербург, Россия).
6. International Conference "Condensed Matter Research at the IBR-2" (June 2014., Dubna, Russia).
7. VII Eurasian Conference “Nuclear science and its application” (October 2014 y., Baku, Azerbaijan).
8. “Fizikanın müasir problemləri” VII Respublika Konfransı (dekabr, 2014-cü il, Bakı, Azərbaycan).
9. 49-я Школа ФГБУ «ПИЯФ» по ФКС, (март 2015г, Санкт-Петербург Россия).
10. “Fizikanın müasir problemləri” IX Respublika konfransı (dekabr, 2015-cü il, Bakı, Azərbaycan).

Çap olunmuş işlər. Dissertasiyanın əsas məzmunu 6 məqalədə, 12 tezisdə dərc olunmuşdur.

Dissertasiyanın həcmi, quruluşu və əsas məzmunu.

Dissertasiya işi girişdən, 4 fəsildən, nəticələrdən və istifadə edilmiş 176 ədəbiyyatdan ibarətdir. Dissertasiya bütövlükdə, 101 səhifəlik kompyuter mətni, 7 cədvəl və 52 şəkil olmaqla 160 səhifə təşkil edir.

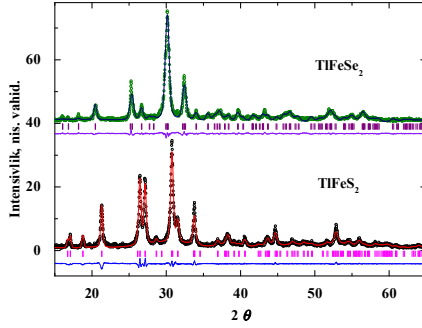
Girişdə mövzunun aktuallığı əsaslandırılaraq, dissertasiya işinin məqsədi, elmi yeniliyi və praktiki əhəmiyyəti formalaşdırılmışdır. Müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar sadalanmışdır.

Birinci fəsil icmal xarakteri daşımaqla, Tl-Fe-S(Se) sistemlərinə daxil olan mümkün birləşmələrin quruluş xüsusiyyətləri

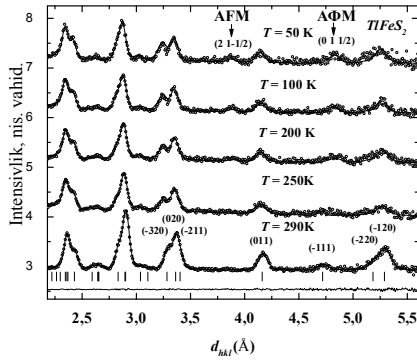
haqqında məlumat verilmişdir. İndiyə kimi məlum olan müxtəlif fazaların quruluş göstəriciləri nəzərdən keçirilərək, bu və ya digər kristallik fazaların ədəbiyyatda olan fərqli və ziddiyyətli məlumatları müzakirə edilmişdir. Həlli tələb olunan məsələlər müəyyənləşdirilməklə dissertasiyanın məqsədi formalaşdırılmışdır.

İkinci fəsildə difraksiya metodlarının nəzəri və eksperimental əsasları haqqında məlumatlar verilmiş və müvafiq eksperimentlərin aparılması üçün istifadə edilən qurğular geniş şəkildə təsvir edilmişdir. Müasir tədqiqat üsullarından olan difraksiya metodlarının –neytronoqrafiya, elektronqrafiya və rentgenoqrafiyanın oxşar cəhətləri qeyd edilməklə, bu metodlar arasındakı fərqlər də göstərilmişdir. Bu fəsildə TlFeS_2 və TlFeSe_2 birləşmələrinin differensial termik analizləri, rentgenoqrafik və neytronoqrafik tədqiqatlarının nəticələri verilmiş, aşağı temperaturlarda və yüksək təzyiqdə baş verən faza keçidləri, həmçinin TlFeS_2 və TlFeSe_2 birləşmələrinin maqnit quruluşları ilə bağlı alınmış nəticələr müzakirə edilmişdir. DTA, Rentgenoqrafik və neytronoqrafik analizlər göstərir ki, normal şəraitdə, aşağı 10 K və yxarı təxminən 450-500K temperatura (temperaturun artması ilə DTA əyrilərində sistem bir fazalı olduğu halda) qədər bu birləşmələrin strukturları monoklin simmetriyaya, $C2/m$ fəza qrupuna malikdir. Normal şəraitdə qəfəs parametrlərinin qiymətləri: TlFeS_2 üçün $a = 11.646(1) \text{ \AA}$, $b = 5.308(2) \text{ \AA}$, $c = 6.831(3) \text{ \AA}$, $\beta = 116.7^\circ$, $Z = 4$, $V = 377.14(6) \text{ \AA}^3$; TlFeSe_2 üçün $a = 11.998(1) \text{ \AA}$; $b = 5.498(9) \text{ \AA}$; $c = 7.108(8) \text{ \AA}$, $\beta = 118.2^\circ$, $Z = 4$, $V = 413,22(6) \text{ \AA}^3$. Şəkil 1a, 1b, 1c-də $\text{TlFeS}_2(\text{Se}_2)$ üçün rentgenoqrammalar və müxtəlif temperaturlarda alınmış neytron spektrləri göstərilmiş, normal şəraitdəki eksperimental və nəzəri alınmış nöqtələrin fərqlər əyrisi, həmçinin kristallik və maqnit fazalarının difraksiya maksimumlarının nəzəri hesablanmış vəziyyətləri verilmişdir.

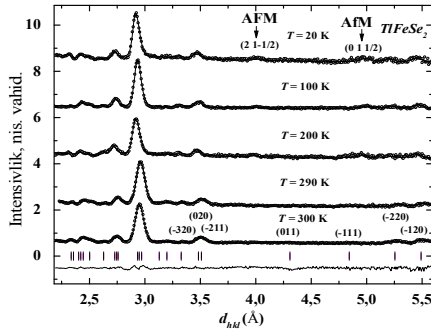
Adi şəraitdə difraksiya spektrləri əsasında hesablanmış elementar özək parametrlərinin qiymətləri, atomların kordinatları və atomlar arası məsafələr cədvəl 1-də verilmişdir. TlFeS_2 -də 200 K-dən aşağı temperaturlarda alınan difraksiya spektrlərində (şəkil. 1b)



a)



b)



c)

Şəkil 1. $TlFeS_2(Se_2)$ (a) və $TlFeS_2$ (b), $TlFeSe_2$ (c) üçün normal şəraitdə və müxtəlif temperaturalarda alınmış difraksiya spektrləri.

antiferromaqnit fazaya çevrilmə ilə nəticələnən və maqnit keçidlə bağlı əsaslı dəyişikliklər müşahidə edilir. TlFeSe₂-də maqnit faza keçidi 290 K-dən aşağı temperaturda müşahidə olunur (şəkil. 1c).

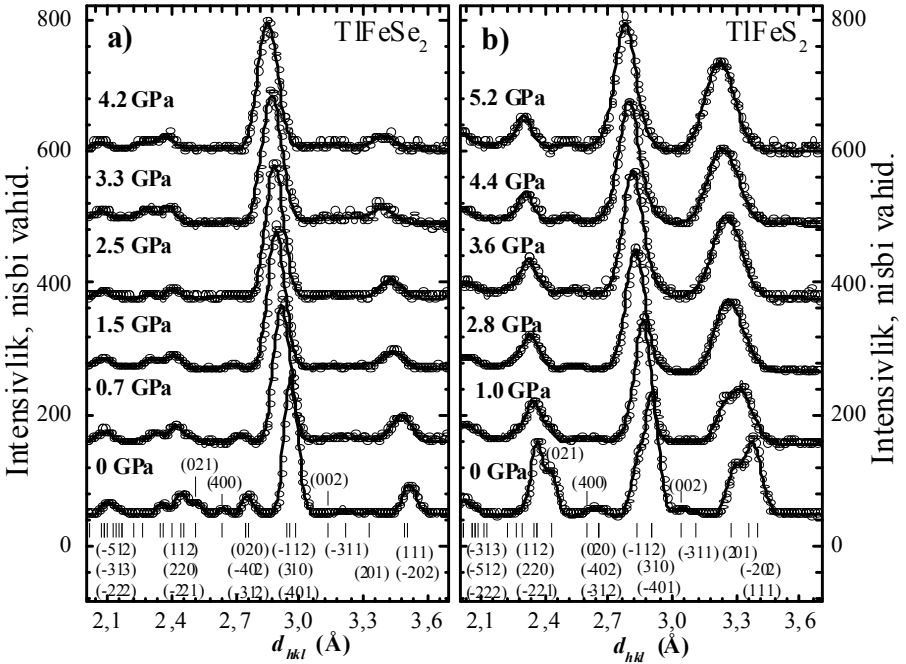
Alınan nəticələr göstərir ki, tədqiq edilən hər iki birləşmədə, faza keçidi nöqtəsində monoklinliyin β bucağında və elementar özəyin həcmində kəskin dəyişiklik baş verir. TlFeS₂ birləşməsində temperatur artdıqca β bucağının azalması müşahidə olunur. TlFeSe₂ birləşməsi üçün isə əksinə temperatur artdıqca β bucağı böyüyür. TlFeS₂-nin temperaturdan asılı olaraq elementar özəyində gedən dəyişikliklər TlFeSe₂ birləşməsinə nisbətən daha sürətlə baş verir.

Cədvəl 1. Otaq temperaturunda TlFeS₂ və TlFeSe₂ birləşmələrində atomların kordinantları və atomlararası məsafə.

	Atom	x	Y	z	Atomlararası məsafə, Å	
TlFeS ₂ C2/m, Z = 4 $a = 11.646(1)$ Å $b = 5.308(2)$ Å $c = 6.831(3)$ Å $\beta = 116.7(4)^\circ$	Tl	0.330(2)	0	0.361(1)	Tl - Tl (1-x, y, 1-z)	3.536(5)
	Fe	0	0.254(1)	0	Fe - Fe (-x, 1-y, -z)	2.610(6)
	S1	0.041(1)	0	0.291(9)	Fe - S1(-x, y, -z)	2.273(1)
	S2	0.717(7)	0	0.120(7)	Fe - S2 (0.5+x, 0.5+y, z)	2.632(7)
TlFeSe ₂ C2/m, Z = 4 $a = 11.998(1)$ Å $b = 5.498(9)$ Å $c = 7.108(8)$ Å $\beta = 118.2(1)^\circ$	Tl	0.333(9)	0	0.367(2)	Tl - Tl (1-x, y, 1-z)	3.511(7)
	Fe	0	0.262(6)	0	Fe - Fe (-x, 1-y, -z)	2.609(8)
	Se1	0.039(1)	0	0.288(6)	Fe - S1(-x, y, -z)	2.367(1)
	Se2	0.685(8)	0	0.094(4)	Fe - S2 (0.5+x, 0.5+y, z)	2.389(1)

Faza keçidindən sonra istilikdən genişlənmə əmsallarının α qiymətlər nisbəti TlFeS₂ və TlFeSe₂ üçün uyğun olaraq 4.2(2) və 1.3(8) dəfə artır. Temperaturun aşağı salınması ilə (otaq temperaturundan) hər iki birləşmə üçün Fe-Fe məsafəsi azalaraq faza keçidi nöqtəsində $l_{\text{Fe-Fe}} \sim 2.501(3)$ Å qiymətini alır. Temperaturun sonrakı azalması ilə Fe – Fe məsafəsinin qiçilməsi zəif olur.

İkinci fəsildə həmçinin, yüksək təzyiqlər altında $TiFeS_2$ və $TiFeSe_2$ nümunələri tədqiq olunmuşdur. $TiFeS_2(Se_2)$ otaq temperaturunda, müxtəlif təzyiqlər altında alınmış neytron difraksiya spektirləri şəkil 2-də verilmişdir. Təzyiq altında da nümunələrin difraksiya spektrləri $C2/m$ simmetriyalı monoklin quruluşa uyğun gəlir. $TiFeS_2$ və $TiFeSe_2$ üçün elementar özək parametirlərinin (a , b , c) xətti sıxılmaları uyğun olaraq $k_a = 0.0111(5) \text{ GPa}^{-1}$, $k_b = 0.0061(9)$



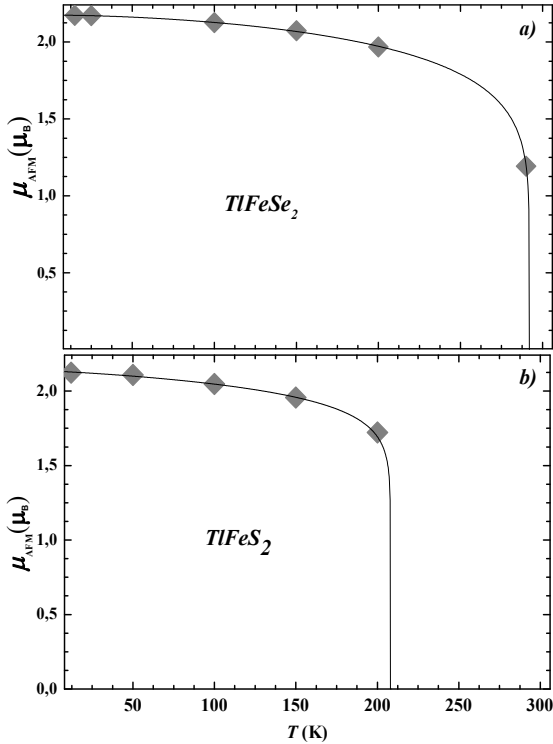
Şəkil 2. $TiFeSe_2$ (a) və $TiFeS_2$ (b) üçün müxtəlif təzyiqlərdə alınmış neytron difraksiya spektirləri.

GPa^{-1} və $k_c = 0.0098(9) \text{ GPa}^{-1}$ və $k_a = 0.0076(2) \text{ GPa}^{-1}$ $k = 0.0045(7) \text{ GPa}^{-1}$ və $k_c = 0.0057(3) \text{ GPa}^{-1}$ Təzyiqin yüksəlməsilə 4.2 GPa $TiFeSe_2$ kristalının monoklinlik bucağı β 118.2°-dən dəyişərək 117.3°-dək azaldığı halda, $TiFeS_2$ -nin monoklinlik bucağı $\beta \sim 116.8^\circ$

dəyişilməz qalır. Həcmi sıxılma isə Berç-Murnagan tənliyi ilə öyrənilmişdir.

$$P = (3/2) B_0 (x^{-7/3} - x^{-5/3}) [1 + (3/4) (B' - 4) (x^{-2/3} - 1)], \quad (1)$$

harada ki, $x = (V/V_0)$ – nisbi həcmnin dəyişməsi, V_0 – elementar qəfəsin $P = 0$ GPa təzyiqdə qiyməti, B_0 və B' – empirik parametrlərdir, fiziki mənalı hərətərəfli sıxılma modulu və onun təzyiqə görə birinci tərtib törəməsidir.



Şəkil 3. AFM fazanın Fe ionlarının effektiv maqnit momentlərinin temperatur asılılıqları və onların (2) funksiyası ilə interpolyasiyası.

Daha sonra bu fəsildə 10-320 K temperatur diapazonunda neytron difraksiyası üsulu ilə $TlFeS_2$ və $TlFeSe_2$ maqnit quruluşları tədqiq edilmişdir. Göstərilmişdir ki, temperaturun aşağı düşməsilə

TiFeS₂ və TiFeSe₂ nümunələrinin neytron difraksiyası spektrlərində maqnit refleksləri yaranır, müvafiq olaraq hər iki birləşmə üçün iki maksimum alınır: TiFeS₂ üçün $d_{hkl} = 3.87 \text{ \AA}$, $d_{hkl} = 4.82 \text{ \AA}$, TiFeSe₂ üçün isə $d_{hkl} = 4.00 \text{ \AA}$, $d_{hkl} = 4.99 \text{ \AA}$. Eksperimental göstəricilərin analizindən məlum olmuşdur ki, bu dəyişikliklər nəticəsində yayılma vektoru $k = (0 \ 0 \ 0.5)$ qiymətini alması antiferromaqnit fazanın yaranmasına dəlalət edir. Antiferromaqnit fazanın Fe ionlarının hesablanmış nizamlı maqnit momentləri TiFeS₂ və TiFeSe₂ üçün müvafiq olaraq $T = 12 \text{ K}$ -də $2.1(2) \mu_B$ və $T = 10 \text{ K}$ -də $2.1(7) \mu_B$ təşkil edir. TiFeS₂ və TiFeSe₂ birləşmələrinin antoferromaqnit fazaları üçün Neel temperaturunun qiymətlərinin təyin olunması məqsədilə Fe ionlarının nizamlı maqnit momentlərinin temperaturdan asılılıqları (Şəkil 3) (1) empirik funksiyası ilə approksimasiya edilmişdir.

$$\mu_{AFM} = A \cdot \left(1 - (T/T_N)^\alpha\right)^\beta. \quad (2)$$

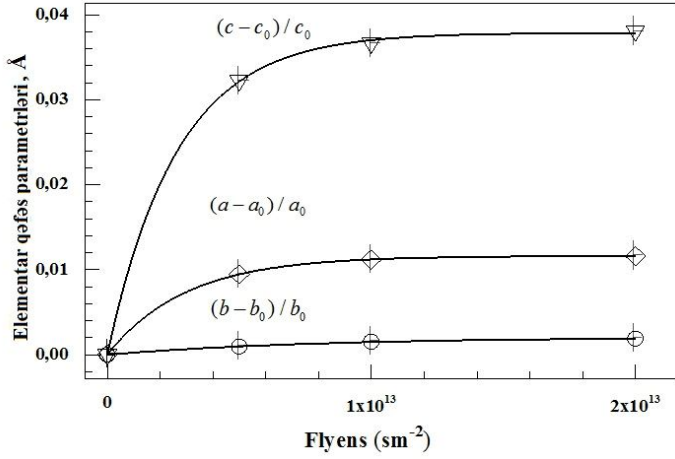
Burada A , α , β – müəyyən uyğunlaşdırıcı parametrlər, T_N – Neel temperaturudur. TiFeS₂ və TiFeSe₂ üçün hesablanmış Neel temperaturları uyğun olaraq $200(5) \text{ K}$ və $290(5) \text{ K}$ təşkil edir.

Üçüncü fəsil şüalanma nəticəsində defektmələgəlmənin və ilkin nümunələrin quruluş xassələrinin dəyişməsinin və səth xarakteristikasının öyrənilməsinə həsr olunmuşdur. TiFeS₂ antiferromaqnit kristallarının Xe⁺²⁶ ionları ilə şüalandırılması, onların səthinə və kristal quruluşlarına şüalanmanın təsiri öyrənilmişdir. 167 MeV-lik Xe ionları nümunələrdə qalınlıq boyu qeyri bircins radiasiya defektlərinin formalaşmasına səbəb olmuşdur. SRIM2008 proqramının köməyi ilə Xe ionlarının getdiyi yolun dərinliyi boyunca ion itkisi enerjisi $(dE/dx)_{ion}$ və radiasiya defektlərinin sayı dpa (displacement per atom) alınmışdır. Hesablamalardan alınan nəticələrə görə enerjisi $E = 167 \text{ MeV}$ olan Xe ionları kristalda $R = 14.69 \text{ mkm}$ qaçış dərinliyindədir. $0.5 \cdot 10^{13}$, $1.0 \cdot 10^{13}$, $2.0 \cdot 10^{13} \text{ ion/sm}^2$ dozalarda şüalandırılmış nümunələr x-ray difraktometrində kristallik xassələri araşdırılmışdı. TiFeS₂ kristalının müxtəlif dozalarda şüalanmadan əvvəlki və sonrakı rentgenoqramları əsasında tam profilli Ritveld analizi üsulu ilə elementar özəyin parametrləri və həcmi hesablanmışdır (şəkil 4a). Göstərilmişdir ki, şüalanma dozası artdıqca elementar özəyin həcmi eksponensial olaraq artır.

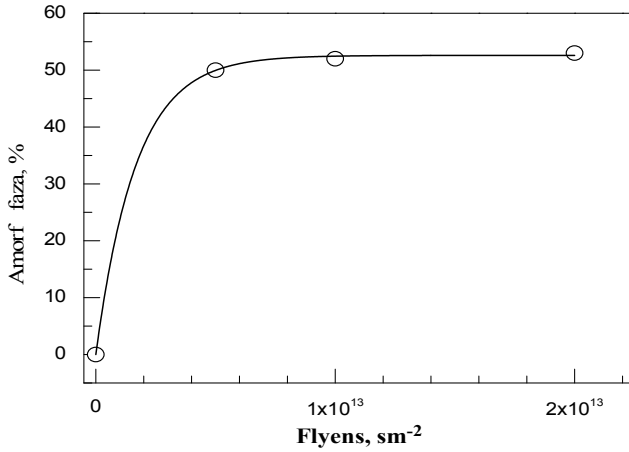
Spektrlərdən alınan fonun sahəsinin tam inteqralı metodu ilə şüalanmış hissəndə, nisbi faizlərlə amorf hissəsinin dozadan asılılığı təyin edilmişdir (şəkil 4b). Nəticələrdən aydın olur ki, kristallarda şüalanmış layda tam amorflaşma getməyərək təxminən 47% kristallik forma mövcuddur. Alınmış spektirlər qalıq kristallik quruluşun verdiyi reflekslərdir və proqramda C2/m simmetriya qrupunda analiz olunur. Əyrilərdən görünür ki, kristalloqrafik parametrlər dozanın artması ilə artaraq $1 \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-2}$ -dən sonra stabilləşirlər. Hesab edirik ki, “kritik” (təxminən $0.32 \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-2}$) dozadan sonrakı artım kristallik özəkdə destabilizasiya, dağılma və stabilləşirlər. Hesab edirik ki, “kritik” (təxminən $0.32 \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-2}$) dozadan sonrakı artım kristallik özəkdə destabilizasiyaya, dağılma və struktur dəyişikliyinə səbəb olur və $1 \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-2}$ -dən sonra stabilləşmə gedir, yəni dəyişmənin sürəti zəfləyirki bu hədd kristalloqrafik parametrlərin qiymətlərinin limit həddidir.

Səthin morfologiyasının şüalanmadan əvvəl və sonra dəyişməsinin tədqiqi SOLVER-NEXT atom-güc mikroskopunda yerinə yetirilmişdir. Nümunələr şüalanmadan və atom-güc mikroskopunun hərəkət edən masasının üzərinə yerləşdirilməzdən əvvəl, atomar miqyaslı təmiz səthin alınması məqsədilə ayrı-ayrı laylar qismində hissələrə bölünmüşdür. Şüalanmanın gücündən asılı olaraq, səthlərdəki müntəzəmlilik müxtəlifliyi şəkil 5-də göstərilmişdir. Profillərdən görünür ki, şüalanma dozası artdıqca nanoölçülü səthin relyefininin maksimumları azalır. Xe ionları səth atomlarının energetik potensialını yüksəldir çox saylı toqquşmalar səthdəki atomlar arasındakı məsafəni böyüdür, nəticədə nanoölçüdə periodikliyin azalması müşahidə olunur.

Şüalanmadan əvvəl və sonra TlFeS_2 nümunələrində səthin kəmiyyət asılılıqları alınmışdır (şəkil 6). Histoqramlara (şəkil 6.) əsasən, səthin bölünmə periodikliyi strukturu, maksimum dəyəri Z_{ij} , orta kvadratik kəlkötürlüyü, asimetriya əmsalı və piklərin itiliyini xarakterizə edən basıqlıq əmsalı dəyişir. Səthi xarakterizə edən bu parametrlərin dozadan asılılıq əyriləri şəkil 7 - də verilmişdir. Alınan nəticələr baxılmış doza intervalında interpolyasiya edilərək bütün əyrilərin eksponensial dəyişməsi göstərilmişdir.

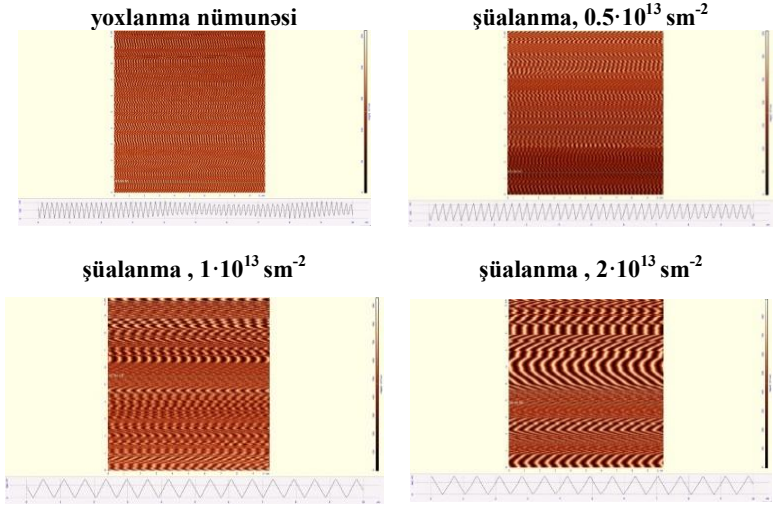


Şəkil 4a. *TlFeS₂ kristallarının elementar özək parametrlərinin nisbi dəyişməsinin flyens asılılığı.*

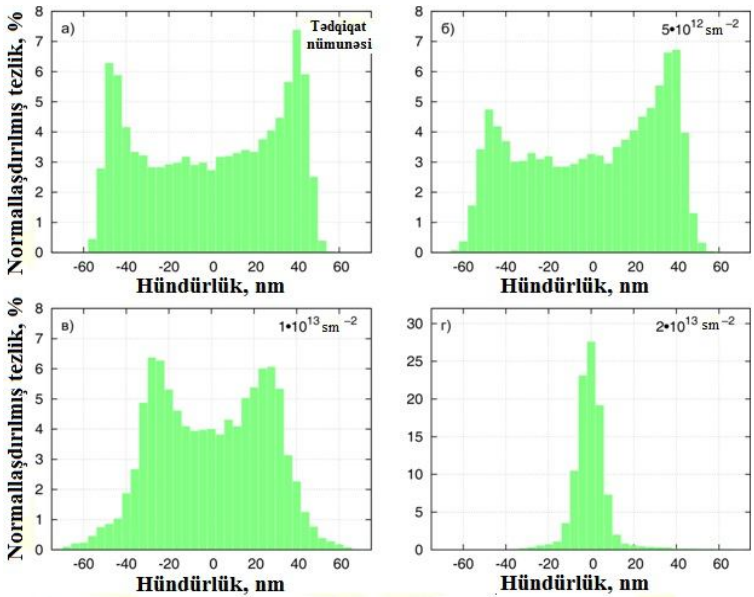


Şəkil 4b. *Şüalanmış hissənin nisbi faizlə amorf hissəsinin dozadan asılılığı.*

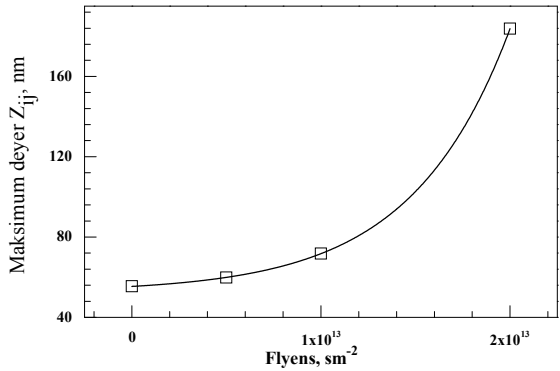
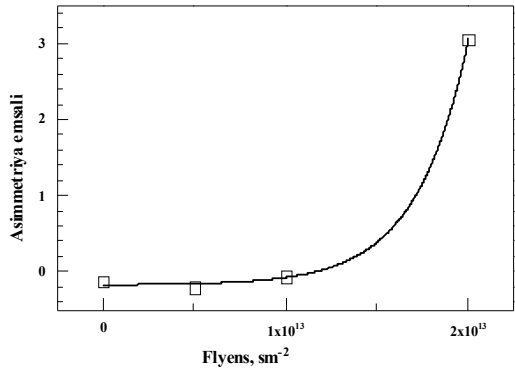
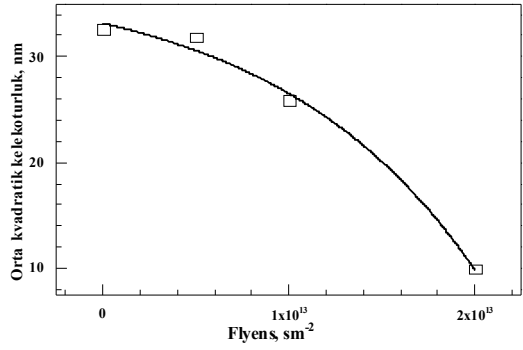
Səthin ölçüsü 10x10 nm, profil



Şəkil 5. Səthlərdəki müntəzəmlilik müxtəlifliyi.və periodlikliyin maksimumklarının dəyişməsidəyişməsi.



Şəkil 6. Səthin kəmiyyət asılılıqlarının histografları.



Şəkil 7. Səthi xarakterizə edən parametrlərin dozadan asılılıq ayriləri.

$$A(\phi) = A_1(1 - e^{-\sigma\phi}) + A_0 \quad (3)$$

Hardaki ϕ (ion/sm²) - şüalanma dozası, σ (sm²) - effektiv kəsik (ionların səthdə yaratdıqları dəşiyin sahəsi), A_0 və A_1 sabitlərdir. İnterpolyasiyadan alınan nəticələr və nisbi xətalər cədvəl 2-də göstərilmişdir. Cədvəldəki qiymətlərdən istifadə edərək effektiv kəsik üçün orta qiymət hesablanmışdır $\bar{\sigma} = 31.6 \text{ nm}^2$.

Cədvəl 2. Müxtəlif parametrlərin interpolyasiyadan alınan nəticələri və nisbi xətalər.

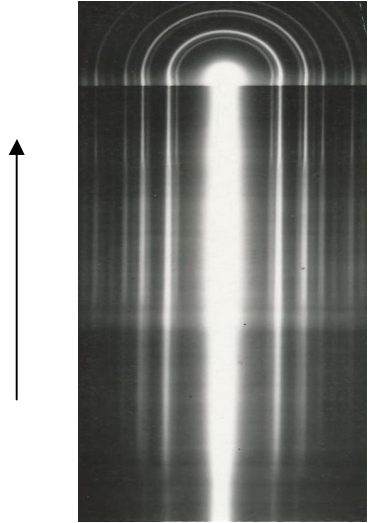
Funksiya və parametrləri Funksiyanın adı	$A(\phi) = A_1(1 - \exp(-\sigma\phi)) + A_0$			Standart xəta		
	$A_0 + A_1$	A_1	σ	$(A_0 + A_1)_e$	A_{1e}	σ_e
Parametr, a , Å	11.765	0.135	$3.67 \cdot 10^{-13}$	0.005	0.003	$4 \cdot 10^{-15}$
Parametr, b , Å	5.313	0.011	$1.28 \cdot 10^{-13}$	0.004	0.003	$1 \cdot 10^{-14}$
Parametr, c , Å	7.078	0.258	$3.78 \cdot 10^{-13}$	0.003	0.004	$2 \cdot 10^{-14}$
Monoklinlik bucağı β °	116.780	1.923	$4.91 \cdot 10^{-13}$	0.009	0.015	$2 \cdot 10^{-14}$
Qəfəsin həcmi V , Å ³	375.435	12.596	$3.03 \cdot 10^{-13}$	0.122	0.180	$1 \cdot 10^{-14}$
Asimmetriya əmsali	-0.173	-0.003	$-3.50 \cdot 10^{-13}$	0.049	0.002	$1 \cdot 10^{-13}$
Maksimum dəyər Z_{ij}	52.627	-2.780	$-1.93 \cdot 10^{-13}$	0.103	0.042	$7 \cdot 10^{-16}$

Effektiv kəsiyin qiymətindən istifadə edərək və izlərin (track) formasını silindirik qəbul edib, trekin ölçüsü üçün $d = \sqrt{4\sigma/\pi} = 6.34 \text{ nm}$ qiyməti alırıq. İonlarla şüalanmada amorflaşmanın başlaması o vaxt yaranır ki, treklər bir-birlərini örtün. Dozanın vahid səthə düşən ionların sayı olduğunu bilərək amorflaşmanın başlama dozası təxminən $0.32 \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-2}$ qiymətləndirilir. Histoqramlardan aydın görünür ki, şüalanmanın dozası artdıqca səthin sıfırcı müstəvisindən dərinlikləri ilə hüdürlüklər fərqi ΔZ daha kiçik oblastı əhatə edir, yəni səthin kələkötürlülüyü azalır və hamarlaşma müşahidə olunur. Şüalanmamış nümunənin histoqramı ilə dozası $0.5 \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-2}$ şüalanmış nümunənin histoqramı praktiki olaraq dəyişməmişdir, yəni asimmetriya əmsalları və basıqlıq

əmsalları demək olar ki, yaxın qiymətlər alırlar. Dozanın sonrakı artımı ($1 \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-2}$) ilə asimmetriya əmsalı mənfi qiymətdən sıfıra yaxınlaşır və kələkötürlülük azalır. Dozanın sonuncu $2 \cdot 10^{13} \text{ sm}^{-2}$ qiymətində histoqramda bir Qaus formalı maksimum alınır ki, bu zaman asimmetriya əmsalı müsbət qiymətə çatır və bu halda səth daha “hamar” vəziyyətdə olur. Şəkil 6-da səthin kəmiyyət asılılıqları histoqramlarında sonuncu dozada alınmış Qaus formalı pikin forması tam aydın görünməkdədir. Görünür ki, dozanın artması ilə ikili piklərin yaxınlaşması, yəni qabaritlərlə çöküklərin fərqlinin kiçilməsi müşahidə olunur və sonda ikili piklər bir Qaus formalı piklə əvəz olunur.

Dördüncü fəsildə faza çevrilmələrinin nəzəri əsasları verilmişdir. Tl-Fe-S(Se) sistemlərində yaranan nazik təbəqələrin qarşılıqlı təsiri və fazaəmələgəlmə proseslərinin tədqiqinin nəticələri ümumiləşdirilərək təsvir olunmuşdur. Nümunələrdən alınmış elektronogramlardan məlum olmuşdur ki, kondensasiya müstəvilərinin üzərində müxtəlif tərkibli amorf və iki (FeS(Se) və FeS₂(Se₂)) kristallik faza yaranır. FeS(Se) və FeS₂(Se₂) polikristalları, uyğun olaraq rombik, fəza simmetriya qrupu *F222* və kubik fəza simmetriya qurupu *Pa-3* qəfəsləri əsasında indekslənilirlər. Amorf. TlFeS(Se)₂ üçqat birləşmələri isə termik işləmədən sonra monoklinik *C/2m* fazada kristallaşır.

Bu fəsildə, həmçinin, adi şəraitdə və $3000 \text{ V} \cdot \text{sm}^{-1}$ intensivlikli xarici elektrik sahəsi təsiri altında alınmış TlFeS₂ və TlFeSe₂ tərkibli amorf təbəqələrin kristallaşma kinetikası da tədqiq edilmişdir (şəkil 8). Elektrik sahəsinin təsiri altında buxarlandırılmış TlFeS₂(Se₂) amorf təbəqələrin ümumi aktivləşmə enerjilərinin qiymətləri, həmçinin ilkin özəklərin rüşeym halında yaranmaları və onların sonrakı böyümələri üçün tələb olunan aktivləşmə enerjilərinin qiymətləri, adi şəraitdə alınmış amorf təbəqələrin müvafiq qiymətlərindən nisbətən az olmuşdur (cədvəl 4). Adi şəraitdə və intensivliyi 3000 V/sm olan elektrik sahəsinin təsiri altında alınan TlFeS₂ və TlFeSe₂ tərkibli nanoqalınlıqlı amorf təbəqələrinin kristallaşma kinetikası $V_t = V_0 [1 - \exp(-kt^m)]$ analitik tənliyi ilə təsvir edilir.



Şəkil.8. $TlFeS_2(Se_2)$ təbəqəsinin kristallaşmasını əks etdirən kinematik elektronogram.

Cədvəl 3 $TlFeS_2$ və $TlFeSe_2$ amorf təbəqələrin kristallaşmalarının kinetik parametrləri.

Birləşmə	İntensivlik $V \cdot sm^{-1}$	$E_{üm.}$ kkal/mol	E_r kkal/mol	E_b kkal/mol
$TlFeS_2$	U=0	141,6	42,3	33,1
	U=3000	125,2	37,8	29,5
$TlFeSe_2$	U=0	133,7	36,1	25,4
	U=3000	117,9	32,6	22,7

Müəyyən olunmuşdur ki, kristallaşma proseslərinin sürətlənməsinə, faza çevrilmələri temperaturunun aşağı düşməsinə və aktivləşmə enerjilərinin qiymətlərinin nəzərə çarpacaq dərəcədə azalmasına gətirib çıxaran elektrik sahəsinin təsir effekti, onun monokristal altlıqlar üzərindəki və ya nazik təbəqələrdəki elektrikle

yüklənmiş nöqtəvi defektlərə təsiri ilə əlaqədardır. Eksperimental olaraq müşahidə edilən bu faktın digər izahı ondan ibarətdir ki, rüşeyməmələgəlmə ilk növbədə kristalın səthində olan elektrik yüklü nöqtəvi defektlərdə yəni “elektrik aktiv” nöqtələrdə baş verir.

Xarici elektrik sahəsinin təsiri altında mikrokristallar (adacıqlar) elektrikle stimullaşdırılmış və ya termiki aktivləşdirilmiş miqrasiyaya məruz qalırlar. Miqrasiya nəticəsində mikrokristalların əmələgəlmə mərkəzlərindən yerini dəyişməsi yeni rüşeymlərin əmələgəlmə aktının təkrarlanmasına səbəb olur. Beləliklə, elektrik sahəsinin təsiri altında miqrasiya güclənir və nəticədə kristallaşma prosesi sürətlənir.

Əsas nəticələr

1. TlFeS_2 nümunələri $(0.5-2.0) \cdot 10^{13}$ ion/sm² dozalarda 167 Mev enerjili Xe^{+26} ionları ilə şüalandırılaraq, onların radiasiyaya davamlılığı, şüalanma nəticəsində defektəmələgəlmə mexanizmi öyrənilmişdir. Nümunələrin şüalandırılmadan öncə və sonra nano ölçülü səthinin morfoloqiyası tədqiq edilmiş, səth və qəfəs parametrlərinin baxılan doza intervalında eksponensial $A(\phi) = A_1[1 - \exp(-\sigma\phi)] + A_0$ dəyişməsi göstərilmişdir.
2. Müxtəlif dozalarda səthin quruluşunun bölünmə periodikliyi, maksimum dəyəri Z_{ij} , orta kvadratik kələkötürlüyü, asimmetriya və piklərin itiliyini xarakterizə edən basıqlıq əmsalı hesablanmış və şüalanmanın təsiri altında səthin hamarlaşdırması göstərilmişdir. Amorflaşmanın başlama dozası $0.32 \cdot 10^{13}$ sm⁻² qiymətləndirilmişdir. Effektiv kəsik üçün orta qiymət hesablanmış ($\bar{\sigma} = 31.6$ nm²) və müəyyən edilmişdir ki, ionların getdiyi yol boyu yaratdıqları dəşiyin (track) ölçüsü $d = 6.34$ nm-ə bərabərdir.
3. $\text{TlFeS}_2(\text{Se}_2)$ birləşmələri üçün $T = 12-300$ K temperatur oblastında müəyyən edilmişdir ki, temperaturun aşağı düşməsilə Fe-Fe atomlararası məsafələri azalır, faza keçidi

nöqtəsində $l_{Fe-Fe} \sim 2.501(3) \text{ \AA}$ qiymətini alır və β monoklin bucağının faza keçidi nöqtələrində (200 və 290 K) sıcrayışla dəyişməsi baş verir. TlFeS₂-də temperaturdan asılı olaraq həcmnin dəyişilməsi TlFeSe₂ birləşməsinə nisbətən daha kəskin baş verir. TlFeS₂ və TlFeSe₂ birləşmələrinin istilikdən genişlənmə əmsalları qiymətlərinin nisbət artımı faza keçidinə qədər və faza keçidindən sonra, uyğun olaraq 4.2(2) və 1.3(8) dəfə təşkil edir. Antiferromaqnit fazanın Fe ionlarının nizamlanmış maqnit momentləri, TlFeS₂ üçün $T = 12 \text{ K}$ –də $2.1(2) \mu_B$, TlFeSe₂ üçün isə $T = 10 \text{ K}$ – də $2.17(7) \mu_B$ və (ab) müstəvisində c oxu boyunca antiparalel istiqamətlənmişdir. Antiferromaqnit nizamlanma nəticəsində maqnit qəfəs kristal qəfəsin c oxu istiqamətində 2 dəfə böyümüş olur.

4. Yüksək təzyiqlərdə TlFeSe₂ kristalının β monoklin bucağı 118.2° -dən 117.3° -dək azalır, TlFeS₂-nin monoklin bucağı isə $\beta \sim 116.8^\circ$ sabit qalır. Qəfəs parametirlərinin xətti sıxılmaları hesablanmış və müəyyən edilmişdir ki, elementar qəfəsin nisbi həcmnin təzyiqdən asılılığı interpolyasiyasının Berç – Murnaqaqa tənliyinin üçüncü qaydasına tabe olur.
5. Müəyyən edilmişdir ki, Tl – Fe – S(Se) sisteminin termik buxarlandırma üsulu ilə alınmış nanoqalınlıqlı təbəqələrinin qarşılıqlı təsiri nəticəsində üçqat TlFeS₂(Se₂) birləşmələri amorf halında olur. Alınan amorf TlFeS₂ və TlFeSe₂ təbəqələrinin kristallaşma kinetikasi Avrami-Kolmoqorov qanunauyğunluğuna tabe olaraq $V_t = V_0[1 - \exp(-kt^m)]$ analitik tənliyi ilə təsvir olunur. TlFeS₂(Se₂) tərkibli amorf quruluşlu nanolayların kristallaşmalarının kinetik parametrləri təyin edilmişdir.

Əsas nəticələrin çap olunduğu işlər

1. A.I. Madadzada, E.B. Asgerov, D.I.Ismayilov R.N.Mehdiyeva E.M.Kerimova. Neutron and x-ray diffraction studies of the crystal

structure of TlFeS_2 compound. **Azerbaijan Journal of Physics**, **2013**, volume XIX, No-2, section az., p.26-29

2. **Э.Б. Аскеров**, А.И. Мададзада Д.И. Исмаилов, Р.Н Мехтиева. Исследование кристаллической и магнитной структуры соединения TlFeS_2 методом порошковой дифракции нейтронов. IV международный симпозиум **Multiferroics-4 2013** г. Ростов-на-Дону, г. Туапсе, с.54-58
3. **Э.Б. Аскеров**, А.И. Мададзада Д.И. Исмаилов, Р.Н Мехтиева. Межд. молодежная науч. Школа. Фазообразование в системе $\text{Tl} - \text{Fe} - \text{S}$. "Современная нейтронография" 28 октября – 1 ноября **2013**, г. Дубна, Россия, с.7-8
4. **Э.Б. Аскеров**, А.И. Мададзада, Д.И. Исмаилов, Р.Н. Мехтиева, А.И. Бескровный, Э.М. Керимова, Д. Неов, С.Г. ШEVEREV. Исследование кристаллической структуры соединения TlFeSe_2 методами дифракции нейтронов и рентгенографическим анализом. **Известия ТулГУ**. сер. естеств. Науки. Материалы MMSN II 11-14 ноября **2013**, Россия Тула. ст.163-169
5. **Э.Б. Аскеров**, А.И. Мададзада Д.И. Исмаилов, Р.Н. Мехтиева, А.И. Бескровный, Э.М. Керимова. Исследование кристаллической структуры соединения TlFeSe_2 с помощью упругое рассеяние нейтронов. 8-ci KONFRANS «Radiasiya tədqiqatları və onların praktiki aspektləri» 20-21 Noyabr **2013**, Azərbaycan, Bakı, s.53-54
6. А.И. Мададзада, **Э.Б. Аскеров**, Д.И. Исмаилов, Р.Н. Мехтиева. Взаимодействие гетерогенных тонких пленок в системе Tl-Fe-S . 48-я Школа ФГБУ «ПИЯФ» по Физике Конденс.сост., 10-15 март **2014** г, Санкт-Петербург, стр.113
7. **Э.Б. Аскеров**, А.И. Мададзада, Д.И. Исмаилов, Р.Н Мехтиева. А.И. Бескровный. Исследование кристаллической структуры соединения TlFeSe_2 . 48-я Школа ФГБУ «ПИЯФ» по Физике Конденс.сост., 10-15 март **2014** г, Санкт-Петербург, стр.52
8. **Э.Б. Аскеров**, А.И. Мададзада Д.И. Исмаилов, Р.Н. Мехтиева, А.И. Бескровный, Э.М. Керимова. Исследование структурного перехода $\text{TlFeS}_2(\text{Se}_2)$ при низких температурах методом порошковой дифракции нейтронов. International Conference "Condensed Matter Research at the IBR-2" 24- 27 June **2014**, Dubna, Russia, p.27
9. **Э.Б. Аскеров**, А.И. Мададзада Д.И. Исмаилов, Р.Н. Мехтиева. Взаимодействие гетерогенных тонких пленок и образование фаз в системе Tl-Fe-S . **Физика и техника полупроводников**, **2014**, том 48, вып. 9, с.1265-1268.
10. **Э.Б. Аскеров**, А.И. Мададзада Д.И. Исмаилов, Р.Н. Мехтиева. Электронографическое исследование образования фаз $\text{Tl} - \text{Fe} - \text{Se}$ и

кинетики фазовых превращений пленок TlFeSe_2 . **Физика и техника полупроводников**, 2014, том 48, вып. 11, с.1484-1486

11. **Е.В. Asgerov**, A.I. Madadzada, D.I. Ismayilov R.N. Mehdiyeva A.I. Beskrovnyy, E.M. Kerimova. Magnetic phase transitions in strongly chained semiconductor compounds TlFeS_2 and TlFeSe_2 . VII Eurasian Conference NUCLEAR SCIENCE AND ITS APPLICATION, 21-24 October 2014, Baku, Azerbaijan, p.265
12. **Э.Б. Аскеров**, А.И. Мададзада Д.И. Исмаилов, Р.Н. Мехтиева, Э.М. Керимова, А.И. Бескровный. Магнитная структура TlFeS_2 и TlFeSe_2 . VII Респуб. Конф. "Современные проблемы физики" Баку, БГУ, 19-20 декабрь 2014, с.80-82
13. **Э.Б. Аскеров**, А.И. Мададзада, А.И. Бескровный, Д.И. Исмаилов, Р.Н. Мехдиева, С.Г. Джабаров, Э.М. Керимова, Д. Неов. Нейтронографическое исследование TlFeS_2 и TlFeSe_2 при низких температурах. **Поверхность**, №12, 2014, с.5-10
14. **Е.В. Asgerov**, N.T. Dang, D.I. Ismayilov, S.E. Kichanov, R.N. Mehdiyeva, A.I. Madadzada, S.H. Jabarov, E.M. Kerimova, E.V. Lukin High-pressure effect on the chain-like crystal structure of the semiconductors TlFeSe_2 and TlFeS_2 // **Modern Physics Letters B**, 2015, 1300107-1 (pages 8)
15. **Э.Б. Аскеров**, Д.Н. Тоан, А.И. Бескровный, А.И. Мададзада, Д.И. Исмаилов, Р.Н. Мехдиева, С.Г. Джабаров Э.М. Керимова. Магнитная структура в халькогенидах TlFeS_2 и TlFeSe_2 **Физика и техника полупроводников**, том.49, вып.6, 2015, ст.899-903
16. **Э.Б. Аскеров**, А.И. Мададзада М. Kulik, А. Сафарзаде, Р.Н. Мехдиева, Д.И. Исмаилов, А.И. Бескровный, Э.М. Керимова, А. Olejniczak. Исследования изменения морфологии поверхности TlFeS_2 до и после облучения ионами Xe^{+26} 49-я Школа ФГБУ «ПИЯФ» по ФКС, март 2015 г, Санкт-Петербург Россия, с.53
17. **Аскеров Э.Б.**, Мададзада А.И., Kulik М., Сафарзаде А., Мехдиева Р.Н., Исмаилов Д.И., Бескровный А.И., Керимова Э.М., Olejniczak А., Неов Д. Влияние облучение ионами Xe^{+26} на структуру TlFeS_2 /19-я Международная научная конференция молодых ученых и специалистов к 100 летию Ф.Л. Шапиро, Дубна Россия, 16-20 февраля 2015 г. с.1
18. **Е.В. Əsgərov**, С.İ. İsmayilov, R.N. Mehdiyeva, S.H. Cabarov, M.N. Mirzəyev, E.M. Kərimova, TlFeS_2 və TlFeSe_2 birləşmələrinin rentgenoqrafik və diferensial-termik analizləri "Fizikanın müasir problemləri" IX Respublika konfransı Bakı 2015, 1s.

ЭЛЬМАР БАГИР оглы АСКЕРОВ

**ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ, ТЕМПЕРАТУРЫ И ДАВЛЕНИЯ НА
КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ И МАГНИТНУЮ СТРУКТУРЫ
АНТИФЕРРОМАГНЕТИКОВ $TlFeS_2(Se_2)$**

Р Е З Ю М Е

Были изучены процессы радиационной устойчивости и процессы дефектообразования в монокристаллах $TlFeS_2$ облучены ионами He^{+26} с энергией 167 МэВ при дозах $0.5 \cdot 10^{13}$, $1.0 \cdot 10^{13}$, $2.0 \cdot 10^{13}$ ион/см². Исследована наноразмерная морфология поверхности объектов состава $TlFeS_2$ до и после их облучения. Определено, что параметры элементарной ячейки и объем кристаллической решетки экспоненциально увеличиваются с повышением дозы облучения. Зависимости характеристик поверхности (коэффициента асимметрии распределения неровностей, среднеквадратичной шероховатости и максимального значения неровности поверхности Z_{ij}) от дозы облучения, тоже является экспоненциальным и обе зависимости выражаются с экспоненциальной функцией $A(\phi) = A_1(1 - \exp(-\sigma \phi)) + A_0$. Рассчитаны значения коэффициентов интерполяционной кривой и относительные отклонения. Свободный пробег ионов Хе с энергией 167 МэВ составляет $R = 14.69$ мкм, эффективный диаметр трека $d \approx 6.34$ нм, а «критическая доза» (при которой начинается перекрытие треков) приблизительно равен $0.3 \cdot 10^{13}$ ион/см².

На основе анализа результатов исследований методом нейтронной дифракции установлено, что при понижении температуры, начиная с комнатной температуры угол моноклинности в $TlFeS_2$ увеличивается, а в $TlFeSe_2$ уменьшается. Расстояние Fe – Fe в обоих соединениях уменьшаясь в точке фазового перехода принимает значение $l_{Fe-Fe} \sim 2.501(3)$ Å. В АФМ фазе упорядоченные магнитные моменты ионов Fe для $TlFeS_2$ при T=12K составляет $2.1(2)$ μ_B . Аналогичное значение для $TlFeSe_2$ при T=10K равно $2.17(7)$ μ_B . С увеличением давления до 4.2 ГПа, угол моноклинности кристалла $TlFeSe_2$ изменяется от $\beta = 118.2^\circ$ до 117.3° , а угол моноклинности $TlFeS_2$ остается не измененным $\beta = 116.8^\circ$. Показано, что интерполяция зависимости относительного объема элементарной решетки от давления описывается третьим правилом уравнения Берча-Мурнагана.

В результате взаимодействия нанотолщинных пленок систем Tl – Fe – S(Se), полученных термическим испарением трехкомпонентные соединения $TlFeS_2(Se_2)$ формируются в аморфном состоянии. Показано, что кинетика кристаллизации аморфных пленок, полученные под воздействием электрического поля и вне его подчиняется закономерностям, установленным Аврами-Колмогоровым.

ELMAR BAGIR ogly ASGAROV

***EFFECT OF IRRADIATION, TEMPERATURE AND PRESSURE ON
THE CRYSTAL AND MAGNETIC STRUCTURE OF THE
ANTIFERROMAGNETS TlFeS₂(Se₂)***

A B S T R A C T

Induced defects in TlFeS₂ monocrystals irradiated with 167 MeV Xe⁺²⁶ ions at the doses of $0.5 \cdot 10^{13}$, $1.0 \cdot 10^{13}$, $2.0 \cdot 10^{13}$ ion/sm² were investigated. Nanoscale surface morphologies of the samples were studied before and after irradiation, too. It was determined that the parameters of the unit cell and the volume of the crystal lattice was exponentially increased with increasing irradiation dose. Dependence of the surface characteristics (roughness distribution coefficient of asymmetry, Root mean square roughness and maximum surface roughness Z_{ij}) on the irradiation doses was also determined as exponential. These both dependences were expressed by exponential function $A(\phi) = A_1(1 - \exp(-\sigma\phi)) + A_0$. Coefficients and the relative standard deviation were derived from an interpolation of the curve. Mean free path length of Xe ions (167 MeV) was $R = 14.69$ mkm, the effective diameter of the track was $d \approx 6.34$ nm and a «critical dose" (tracks begin to overlap) was approximately equal to $0.3 \cdot 10^{13}$ ion/sm².

Results of neutron diffraction analysis under temperature (10-300K) and pressure (0-5 GPa) showed that monoclinic angle increased in TlFeS₂, but decreased in TlFeSe₂ when temperature increased. In the result, the interatomic Fe – Fe distance decreased and reached to $\sim 2.501(3)$ Å for both compounds at phase transition point. Magnetic moments of Fe ions were 2.1(2) μB (T=12K) for TlFeS₂ and 2.17(7) μB (T=10K) for TlFeS₂ in the AFM phase. At pressure of 4.2 GPa, monoclinic angle (β) for TlFeSe₂ decreased from 118.2° to 117.3°, for TlFeS₂, however, remained unchanged ($\sim 116.8^\circ$). Interpolation of pressure dependence of the relative cell was described by the Birch–Murnaghan equation was shown.

Triple compounds TlFeS₂(Se₂) were amorphous due to interaction of nanothick films of Tl–Fe–S(Se) system obtained by thermal evaporation method. It was known that crystallization kinetics of amorphous films TlFeS₂ and TlFeSe₂ complies with Avrami-Kolmogorov law and this was not depend on obtaining conditions (under normal conditions or electric field) of thin films.

**НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК АЗЕРБАЙДЖАНА
ИНСТИТУТ РАДИАЦИОННЫХ ПРОБЛЕМ**

На правах рукописи

ЭЛЬМАР БАГИР оглы АСКЕРОВ

***ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ, ТЕМПЕРАТУРЫ И ДАВЛЕНИЯ
НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ И МАГНИТНУЮ СТРУКТУРЫ
АНТИФЕРРОМАГНЕТИКОВ $TiFeS_2(Se_2)$***

2225.01 – Радиационное материаловедение

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени доктора
философии по физике

БАКУ – 2016