

**AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI**

*Əlyazması hüququnda*

**AŞAĞI TEMPERATURLARDA  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  BƏRK  
MƏHLULLARININ KRİSTAL VƏ MAQNİT QURULUŞLARI**

İxtisas: 2220.01-Yarımqeçiricilər fizikası

Elm sahəsi: Fizika

İddiaçı: **Rövşən Fikrət oğlu Həşimov**

Fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi almaq üçün  
təqdim edilmiş dissertasiyanın

**AVTOREFERATI**

**Bakı – 2023**

Dissertasiya işi Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi  
Fizika İnstitutunda yerinə yetirilmişdir.

Elmi rəhbər: Fizika-riyaziyyat elmləri namizədi, dosent  
**Faik Ələkbər oğlu Mikayılov**

Rəsmi opponetlər:

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor  
**Dürdanə Həmid qızı Arashı**

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor  
**Həmzə Səməd oğlu Seyidli**

Fizika-riyaziyyat elmləri namizədi, dosent  
**Eldar Şahsuvar oğlu Ələkbərov**

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

Dissertasiya şurasının sədri:

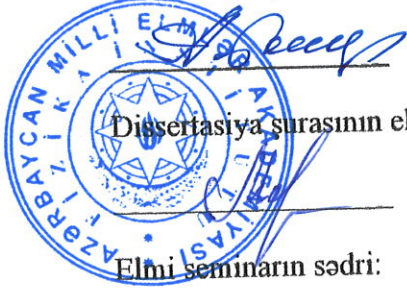
Akademik  
**Arif Məmməd oğlu Həşimov**

Dissertasiya şurasının elmi katibi:

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

Elmi seminarın sədri:

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru,  
dosent  
**Tələt Rzaqulu oğlu Mehdiyev**



## İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

**Mövzunun aktuallığı və işlənmə dərəcəsi.** Təqdim edilən dissertasiya işində aşağı temperaturlar oblastında  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  sisteminin kristal quruluşunda və maqnit xassələrində baş verən dəyişikliklər tədqiq edilmişdir. Məlumdur ki, son zamanlarda mürəkkəb oksidlərin müasir elektronikada və spintronikada tətbiqləri genişlənməmişdir. Bunun əsas səbəbi qeyri-oksit materiallarda oksidləşmə nəticəsində müəyyən müddətdən sonra fiziki xassələrin dəyişməsidir. Ona görə də mürəkkəb oksidlərdə müxtəlif fiziki xassələrin öyrənilməsi, onların tətbiq imkanlarını daha da genişləndirir.

Perovskit quruluşu malik olan mürəkkəb oksidlərdə bir çox maraqlı fiziki xassələr aşkar edilmişdir. Bu materiallar yarımkəçirici xassələrə malik olurlar. Onlarda seqnetoelektrik və ya antiseqnetoelektrik xassələri müşahidə edilə bilər. Bu birləşmələrin tərkibinə maqnit ionları daxil olduqları zamanı ferromaqnit və ya antiferromaqnit xassələri də müşahidə edilə bilər. Həm seqnetoelektrik, həm də ferromaqnit xassələrin müşahidə edildiyi multiferroiklər isə daha mühüm əhəmiyyət kəsb edirlər. Kation – kation əvəzləmələri zamanı bu materiallarda fiziki xassələrin idarə edilməsi mümkündür. Ona görə də perovskit birləşmələr və onların əsasında sintez edilmiş bərk məhlulların fundamental fiziki xassələrinin tədqiq edilməsi kondensə olunmuş hal fizikasının əsas istiqamətlərindəndir. Bu işdə aşağı temperaturlar oblastında  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  ( $x = 0.50, 0.63$  və  $0.78$ ) birləşmələrinin kristal quruluşları və maqnit xassələri tədqiq edilmişdir. Məlumdur ki, maqnitlər əsasən aşağı temperaturlar oblastında maqnit xassələri göstərirlər. Onların tətbiq oblastlarının genişlənməsinin əsas tələblərindən biri, otaq temperaturunda maqnit xassələrinə malik olmalıdırlar. Rentgen və neytron difraksiyası metodu ilə kompleks şəkildə aparılmış tədqiqatlar nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmələr otaq temperaturunda yüksək simmetriyalı kristal quruluşu malik olurlar və ona görə də uzaq maqnit nizamlılığına malik olurlar. Məlumdur ki, kristallar əsasən aşağı temperaturlarda maqnit xassələrinə malik olurlar. İstilik rəqslərinin amplitudlarının artması hesabına maqnit

xassələrinin də zəifləməsi baş verir. Ona görə də  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  birləşmələrinin maqnit xassələri aşağı temperaturlar oblastında tədqiq edilmişdir. Hər bir tərkib üçün Mn atomlarının maqnit momentləri təyin edilmiş, temperaturun təsiri ilə maqnit momentinin qiymətinin dəyişmə mexanizmi müəyyən edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, bu tərkiblər kifayət qədər yüksək simmetriyaya malik Pm-3m fəza qruplu kubik simmetriyaya və ferromaqnit xassələrə malik olurlar. Bu tərkiblər üçün maqnit xassələri quruluş xüsusiyyətləri ilə izah edilmişdir.

#### **Tədqiqat obyektı və predmeti:**

Tədqiqat obyektləri olaraq  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  yarımkeçirici maqnitləri götürülmüşdür. Bu birləşmələr,  $\text{BaMnO}_3$ , birləşməsində Ba atomlarının La atomları ilə qismən kation-kation əvəzləmələri ilə sintez edilmişdirlər. Məlumdur ki, bu tərkiblərdə maqnit xassələrini yaradan Mn atomlarıdır. Lakin La və Ba kationlarının konsentrasiyasından asılı olaraq maqnit xassələrdə dəyişikliklər yaranır. Ona görə də bu tərkiblərin həm kristal quruluşlarının, həm də maqnit xassələrinin tədqiqi bu materialların yeni tətbiq imkanlarını yaradır.

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

Dissertasiya işinin əsas məqsədi lantan atomlarının qismən barium atomları ilə əvəzləməklə  $\text{La}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  perovskitlərinin alınması, aşağı temperaturlar oblastında kristal quruluşlarının, termik və maqnit xassələrinin tədqiqi, aşağı temperaturlar oblastında Mn atomlarının maqnit momentlərinin temperatur asılılığına əsasən bu birləşmələr üçün Küri temperaturunun təyinindən ibarətdir.

**Dissertasiya mövzusunun məqsədində irəli sürülən məsələlərin uğurlu həllini təmin etmək üçün aşağıda qeyd edilən konkret məsələlərin həlli nəzərdə tutulmuşdur:**

- $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  tərkiblərinin sintezi,
- $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  bərk məhlullarının termik stabilliyini və fiziki-kimyəvi xüsusiyyətlərinin tədqiqi,

- $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  ( $x = 0.50, 0.63$  və  $0.78$ ) birləşmələrinin kristal quruluşlarının tədqiqi,
- Bu tərkiblərin kristal quruluşlarına aşağı temperaturların ( $T = 5-295$  K) təsirinin tədqiqi,
- $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  ( $x = 0.50, 0.63$  və  $0.78$ ) birləşmələrinin maqnit xassələrinin təyini,
- Aşağı temperaturlar oblastında  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşmələrində Mn atomlarının maqnit momentlərinin dəyişmə mexanizminin müəyyənəşdirilməsi.

**Tədqiqat metodları:**

Tədqiqat obyektləri polikristal şəklində alınmış və ovuntu halına salınmışdır. Sintez edilmiş tərkiblərin quruluş faza analizləri və kristal quruluşları rentgendifraksiyası metodu ilə tədqiq edilmişdir. Rentgen difraksiya spektrlərinin analizi nəticəsində qəfəs parametrləri, kristal qəfəsin simmetriyası, fəza qrupu və atom koordinatları təyin edilmişdir. Bu tərkiblərin termik sabilliyi, temperaturun təsiri ilə baş verən fiziki-kimyəvi proseslər Diferensial Termik Analiz metodu ilə tədqiq edilmişdir. Aşağı temperaturlar oblastında quruluş tədqiqatları impuls rejimində işləyən neytron difraksiyası metodu ilə aparılmışdır.

Rentgen və neytron difraksiyası spektrləri Ritveld metodu vasitəsilə "VMR1A" və "FullProf" proqramlarından istifadə edilərək analiz edilmişdir. Alınmış kristal quruluşları modelinin qurulması üçün DIAMOND 3.2, qəfəs parametrlərinin və maqnit momentlərinin temperatur asılılıqlarının qurularaq analiz edilməsində Origin 9 proqramlarından istifadə edilmişdir. Müasir proqram təminatlarından istifadə edilməsi, alınmış nəticələrin dəqiqliyini artırmışdır.

**Müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar:**

1. Aşağı temperaturlarda  $\text{Ba}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu və maqnit xassələri. Bu birləşmənin ferromaqnit quruluşu. Temperaturun təsiri ilə bu birləşmədə maqnit momentinin qiymətinin azalma mexanizmi.

2.  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsində ferromaqnit – paramaqnit faza keçidi. Mn atomlarının maqnit momentlərinin temperatur asılılıqları.
3. Aşağı temperaturlarda  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsində kristalloqrafik parametrlərin dəyişmə mexanizmi. İstidən genişlənmə əmsalları.
4.  $\text{Ba}_{0.78}\text{La}_{0.22}\text{MnO}_3$  tərkibinin kristal və maqnit quruluşu. Kubik və ortorombik iki fazalı sistemin kristalloqrafik parametrləri.
5.  $\text{Ba}_{0.78}\text{La}_{0.22}\text{MnO}_3$  tərkibində ferromaqnit – paramaqnit faza keçidi. Temperaturun təsiri ilə bu birləşmədə maqnit momentinin qiymətinin azalma mexanizmi.

**Tədqiqatın elmi yeniliyi:**

1.  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu və kristalloqrafik parametrləri təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, otaq temperaturunda bu birləşmənin kristal quruluşu Fm-3m fəza qruplu kubik simmetriyalı kristal quruluşuna uyğun gəlir.
2.  $T = 5-295$  K temperatur oblastında  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu və maqnit xassələri təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, göstərilən temperatur intervalında Fm-3m fəza qruplu kubik simmetriyalı quruluş saxlanılır. Mn atomlarının maqnit momentləri təyin edilmiş, temperaturdan asılı olaraq maqnit momentinin dəyişmə mexanizmi müəyyən edilmişdir.
3.  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu və qəfəs parametrləri təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmənin kristal quruluşu Fm-3m fəza qruplu kubik simmetriyalı kristal quruluşu uyğun gəlir və qəfəs parametrləri:  $a = b = c = 3.9070$  Å qiymətlərinə malik olur.
4.  $T = 5-295$  K temperatur oblastında  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu və maqnit xassələri təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, göstərilən temperatur intervalında yüsək simmetriyalı kubik quruluş saxlanılır. Mn atomlarının maqnit momentləri təyin edilmiş və müəyyən edilmişdir ki, temperaturun qiyməti yüksəldikcə maqnit momentinin qiyməti  $\mu = 3.53 \mu_B$ -dan  $\mu = 1.47 \mu_B$ -dək azalır.
5.  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  tərkibinin kristal quruluşu təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, bu tərkibin kristal quruluşu iki fazadan ibarətdir. Hər bir fazanın kristalloqrafik parametrləri təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, birinci fazanın kristal quruluşu Pm-3m fəza

qruplu kubik simmetriyalı kristal quruluşa, ikinci fazanın kristal quruluşu isə R-3c fəza qruplu romboedrik simmetriyalı kristal quruluşa uyğun gəlir.

6. Aşağı temperaturlarda  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu və maqnit xassələri təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki,  $T = 5-295$  K temperatur intervalında Mn atomlarının maqnit momentləri təyin edilmiş və müəyyən edilmişdir ki, temperaturun qiyməti yüksəldikcə maqnit momentinin qiyməti  $\mu = 3.58 \mu_B$ -dan  $\mu = 1.49 \mu_B$ -dək azalır.

#### **Tədqiqatın nəzəri və praktiki əhəmiyyəti:**

Perovskit maqnitlər geniş tətbiq imkanları olan funksional materiallar olduğu üçün mühüm nəzəri və praktiki əhəmiyyətə malik olan materiallar hesab edilirlər. Məlumdur ki, yarımqeçirici xassələrə malik olan materiallar müasir elektronikada geniş tətbiq olunur. Onlarda əlavə olaraq həm də maqnit xassələrinin mövcud olması, spintronikada da tətbiq edilməsinə zəmin yaradır.  $\text{ABO}_3$  ümumi formaya malik olan perovskitlərdə  $A$  və  $B$  metallarının ion radiuslarından asılı olaraq müxtəlif kristal quruluşlar müşahidə edilə bilər.  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  ( $x = 0.50, 0.63$  və  $0.78$ ) birləşmələrində ideal kubik quruluş müşahidə edilmişdir. Ona görə də bu tədqiqatlar zamanı alınmış nəticələrdən, bu materialların digər fiziki xassələrinin tədqiqi zamanı model obyekt kimi istifadə edilə bilər. Bu birləşmələrdə müşahidə edilən ferromaqnit quruluş, yeni sintez edilən ferromaqnit xassələrə malik perovskitlərin maqnit xassələrinin tədqiqi zamanı istifadə edilə bilər.

#### **Aprobasiyası və tətbiqi:**

Dissertasiya işində alınmış nəticələr aşağıdakı konfranslarda müzakirə edilmişdir:

- ✓ “Gələcəyə addım” I respublika elmi konfransı, 12-14 aprel 2017-ci il, Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti, Bakı, Azərbaycan.
- ✓ International Conference Condensed Matter Research at IBR-2, Joint Institute for Nuclear Research, Frank Laboratory of Neutron Physics, October 9-12, 2017, Dubna, Russia.
- ✓ ЛII Школа ПИЯФ и Молодежная конференция по физике конденсированного состояния ФКС-2018, Петербургский

институт ядерной физики имени Б. П. Константинова, 12-17 марта 2018 г., Санкт-Петербург, Россия.

- ✓ International Conference "Condensed Matter Research at the IBR-2", Joint Institute for Nuclear Research, Frank Laboratory of Neutron Physics, April 25-29, 2022, Dubna, Russia.

Dissertasiyanın əsas nəticələri 12 publikasiyada (məqalə və tezis) dərc edilmişdir. Onlardan 9-u məqalə (o cümlədən 3-ü WOS platformasında) və 4-ü konfrans tezisidir (o cümlədən 3-ü xaricdə). Nəticələr Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutunun elmi-tədqiqatlarının illik hesabatlarında dərc olunmuşdur.

Müəllifin iştirak dərəcəsi:

Təqdim edilən dissertasiya işinin mövzusu və əsas elmi istiqaməti müəllif və onun elmi rəhbəri tərəfindən seçilmiş, qarşıya qoyulmuş əsas məsələlər müəllifin birbaşa iştirakı ilə təyin edilmişdir. Tədqiqat nümunələrinin sintezində və təcrübü tədqiqatlarda birbaşa iştirak etmişdir. Məqalə və konfrans materiallarının hazırlanmasında aparıcı rol oynamış, hamısında ilk müəllif olmuşdur. Alınmış əsas nəticələr beynəlxalq və respublika səviyyəli konfranslarda müəllif tərəfindən məruzə etmişdir.

**Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilatın adı:**

Dissertasiya işi Azərbaycan Respublikasının Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutunun "Nüvə və yüksək enerjilər fizikası" laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

**Tədqiqatın strukturu və həcmi:**

Dissertasiya işi girişdən, 4 fəsildən, nəticələrdən və 131 adda istifadə olunmuş ədəbiyyat siyahısından ibarətdir. İşin həcmi 45 şəkildən, 4 cədvəldən və ümumilikdə 216267 işarədən ibarətdir.



## İŞİN MƏZMUNU

**Girişdə**, dissertasiya işinin mövzusunun aktuallığı, dissertasiya işinin məqsədi, elmi yeniliklər, işin elmi və praktiki əhəmiyyəti, qarşıya qoyulmuş məqsəd və müdafiəyə çıxarılan müddəalar göstərilmiş, işin aprobasiyası, tədqiqat metodları haqqında geniş şəkildə məlumat verilmişdir.

Dissertasiya işinin **birinci fəsl**i, perovskit kristal quruluşa malik olan birləşmələrin kristal quruluşlarının və maqnit xassələrinin əvvəlki tədqiqatlar zamanı alınmış nəticələrin ədəbiyyat icmalına həsr edilmişdir. Bu tərkiblərin elektron quruluşları və yarımkəçirici xassələri haqqında məlumat verilmiş, müasir elektronikada tətbiq imkanları göstərilmişdir. Perovskit manqanidlərdə  $AMnO_3$  birləşmələrə daxil olan  $A$  metalından asılı olaraq alınmış kristal quruluşlar və quruluş faza keçidləri analiz edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, bu tərkiblərdə  $A$  metalının ion radiusundan asılı olaraq alınmış kristallarda müxtəlif quruluşlar müşahidə edilə bilər. Məlumdur ki, kristalların maqnit xassələri bu quruluşa daxil olan maqnit xassələrə malik olan metal atomlarının nizamlı düzülüşü nəticəsində yaranır.  $A$  metal atomunun maqnit xassəsi olmasa da, kristal quruluşa ciddi təsirini göstərir və Mn atomlarının nizamlı düzülüşünü qismən pozur və ya nizamlılığını gücləndirir. Əvvəlki tədqiqatlar zamanı  $AMnO_3$  birləşmələrinin maqnit xassələrinin tədqiqatları zamanı alınmış nəticələrin ədəbiyyat icmalı təhlil edilmişdir. Vibrasiyalı maqnitometriya və neytron difraksiyası metodları ilə aparılmış tədqiqatlardan məlum olmuşdur ki, bu tərkiblərdə maqnit xassələr əsasən aşağı temperaturlar oblastında müşahidə edilir. Temperaturun qiyməti artdıqca, kristal quruluşu əmələ gətirən atomların istilik rəqslərinin amplitudlarının artması nəticəsində uzaq maqnit nizamlılığını pozulur və ferromaqnit (antiferromaqnit) – paramaqnit faza keçidi baş verir. Bu analizlər əsasən  $BaMnO_3$  və  $LaMnO_3$  perovskit manqanidlərində quruluş xüsusiyyətləri və maqnit xassələrinin tədqiqi zamanı alınmış nəticələr ətrafında aparılmışdır. Bu tərkiblərdə kation-kation əvəzləmələri ilə alınmış  $A'_{1-x}A''_xMnO_3$  birləşmələrinin quruluş xüsusiyyətləri və maqnit xassələri təhlil edilməmiş,  $A'$  və  $A''$  metal

atomlarının ion radiuslarından asılı olaraq baş verən dəyişikliklər analiz edilmişdir.

Fəslin sonunda  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  birləşmələrinin quruluş və maqnit xassələrinin tədqiq edilməsinin əhəmiyyəti, onların tədqiqi zamanı alınan nəticələrin gələcəkdə nəzəri və praktiki tətbiq imkanları göstərilmiş, mövzunun aktuallığı və elmi əhəmiyyəti əsaslandırılmış, bu istiqamətdə aparılacaq tədqiqatların vacibliyi izah edilmişdir.

**İkinci fəsil**, tədqiqat işinin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə edilmiş təcrübi metodlara, cihaz və qurğulara həsr edilmişdir. Tədqiqatlar zamanı son nəsil cihazlardan istifadə edilmişdir. Tədqiqat obyektləri mürəkkəb oksidlərin sintezi üçün uyğun olan standart metodla bərk fazalı halda sintez edilmişdir. Polikristallar şəklində alınmış maddələr həvəngdəstədə əzilərək ovuntu halına salınmış və tədqiqat nümunələri hazırlanmışdır. Perovskit tərkiblərinin quruluş faza analizləri və otaq temperaturunda kristal quruluşları ənənəvi rentgenoqrafiya metodu ilə 40 kV, 40 mA,  $\text{CuK}\alpha$  – şüalanma,  $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$  parametrlərinə malik olan Almaniya istehsalı D8 Advance (Bruker) difraktometrində aparılmışdır. Quruluş faza analizi zamanı alınmış spektrlər baza məlumatları ilə müqaisə edilərək ilkin məlumatlar əldə edilmişdir. Perovskit quruluşların kristalloqrafik parametrlərinin təyin edilməsi üçün spektrlər Fullprof proqramında Ritveld metodu ilə analiz edilmişdir.

Tərkiblərin termik xüsusiyyətləri Diferensial Termik Analiz (DTA), Diferensial Skanedici Kalorimetriya (DSK), Termogravimetrik Analiz (TGA) və Diferensial Termoqravimetrik Analiz (DTG) metodları ilə yüksək temperaturlar oblastunda aparılmışdır. Bu metodlar kristallarda temperaturun təsiri ilə baş verən bir çox hadisələri öyrənmək üçün mükəmməl metoddur. Diferensial termik analiz (DTA) və termoqravimetrik analiz (TGA) tədqiqatları Almaniya istehsalı olan “STA 449 F3 Jupiter®” cihazında yerinə yetirilmişdir. Bu kalorimetrdə işçi oblast otaq temperaturundan 1000 °C-ə kimi, termik işləmə sürəti 0.001- 50 °C/dəq, Julabo F25 soyuducu sistemidir. “Proteus Analysis” proqram təminatından istifadə olunaraq kinetik parametrlər təyin olunmuşdur. Alınmış termik spektrlər “Origin 9” proqramında analiz edilmiş və

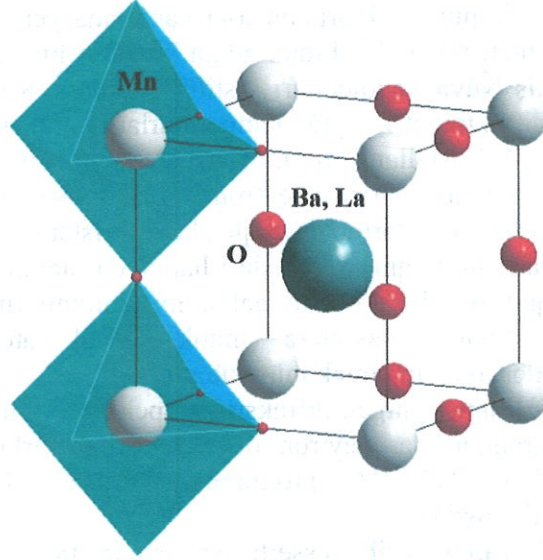
hər bir sistem üçün termodinamik parametrlərin qiymətləri hesablanmışdır.

Aşağı temperaturlarda neytron difraksiyası eksperimentləri “ИБР-2” impuls reaktorunun 6-cı kanalında yerləşən DN-2 neytron difraktometrində (İ.M. Frank adına Neytron Fizikası Laboratoriyası, Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutu, Dubna, Rusiya) aparılmışdır. DN-2 difraktometri, aşağı temperaturlarda (xüsusi hazırlanmış He kamerada) kristalların quruluşlarını və maqnit xassələrini tədqiq etməyə imkan verir. Neytron difraksiyası spektrləri rentgen difraksiyası spektrlərindən fərqli olaraq kristal quruluşla yanaşı həm də kristalların maqnit quruluşları haqqında məlumat verir. Ona görə də maqnit quruluşa uyğun gələn maksimumların intensivliklərinə əsasən maqnit xassələrə malik metal atomlarının maqnit momentlərini təyin etmək mümkündür.

Alınmış rentgen difraksiyası spektrləri “FullProf” və “Origin 9” proqramlarında, neytron difraksiyası spektrləri isə “FullProf”, “MRIA” və “VMRIA” proqramları vasitəsilə Ritveld metodu ilə analiz edilmişdir.

**Üçüncü fəsil**, dissertasiya işində tədqiq edilmiş  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  sisteminin quruluşu və termik xüsusiyyətlərinin tədqiqinə həsr edilmişdir. Ovuntu halında alınmış tədqiqat nümunələrinin kristal quruluşları otaq temperaturunda və normal şəraitdə öyrənilmişdir. Tədqiqatlar ənənəvi rentgen difraksiyası metodu ilə aparılmış, alınmış difraksiya mənzərələri Ritveld metodu ilə Fullprof proqramında analiz edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu  $Fm-3m$  fəza qruplu kubik simmetriyaya uyğun gəlir ( Şəkil 1 ).  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsində dördvalentli Mn atomları koordinat başlanğıcında – elementar özəyin düyünlərində dayanırlar. Bu atomlar O atomları ilə kovalent rabitələr əmələ gətirərək  $\text{MnO}_6$  oktaedrləri formalaşdırırlar. Mn atomları bu oktaedrlərin mərkəzində dayanırlar. Ona görə də otaq temperaturunda bu birləşmədə maqnit xassələrin formalaşması ehtimalı böyükdür. Tərkiblərdə uzaq maqnit nizamlılığının formalaşması üçün quruluşun yüksək simmetriyaya malik olması vacib şərtlərdən hesab edilir. Mn atomlarının maqnit momentlərinin təyin edilməsi üçün neytron difraksiyası tədqiqatlarına ehtiyac vardır.

$\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşundan göründüyü kimi Ba və La atomları elementar qəfəsin mərkəzində dayanaraq növbələşirlər və O atomları ilə kovalent rabitələr əmələ gətirirlər.



**Şəkil 1.  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu.**

$\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin termik xüsusiyyətlərinin tədqiq edilməsi məqsədi ilə DSK, DTA, TG və TGA analizləri kompleks şəkildə aparılmışdır. Alınmış spektrlərin Origin 9 programında analiz edilməsi zamanı müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmə yüksək temperaturlar oblastında kifayət qədər davamlı quruluşa malik olur.

Anoloji olaraq quruluş və termik xassələrin tədqiqi təcrübələri  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün də aparılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki,  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsi  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsi Fm-3m fəza qruplu kubik simmetriyaya uyğun gəlir.

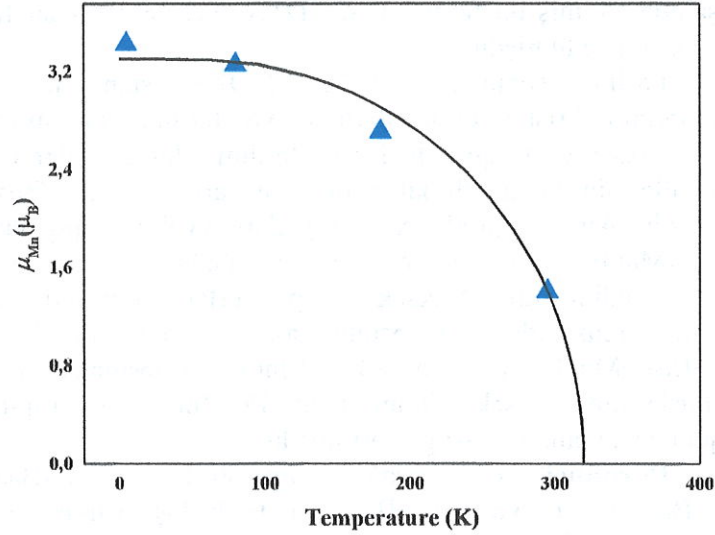
Termik xassələrin tədqiqi zamanı həm istilik selinin temperatur asılılığının DSK və DTA ayrılərində, həm də TG və TGA ayrılərində  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün alınmış nəticələrə uyğun nəticələr alınmışdır.  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşunun tədqiqi zamanı fərqli nəticələr əldə edilmişdir. Otaq

temperaturunda və normal şəraitə alınmış rentgenoqrammanın analiz edilməsi zamanı müəyyən edilmişdir ki, bu tərkibin kristal quruluşi iki müxtəlif fazaya uyğun gəlir. Bu fazaların biri kubik kristal quruluşa, digəri isə romboedrik kristal quruluşa uyğun gəlmişdir. Bu fazaların kristalloqrafik parametrləri: simmetriyası, fəza qrupu, qəfəs parametrləri və atom koordinatları təyin edilmişdir. Kristal quruluşda müşahidə edilmiş bu fərqlər DSC, DTA, TG və TGA analizlərində də müşahidə edilmişdir.

Fəslin sonunda  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  sisteminin müxtəlif tərkiblərinin kristal quruluşlarında və termik xüsusiyyətlərində alınmış oxşar və fərqli cəhətlər göstərilmiş, bu effektlər La və Ba elementlərinin ikivalentli halda ion radiusları arasındakı fərq ilə izah edilmişdir. Alınmış quruluş xüsusiyyətləri əvvəlki tədqiqatlar zamanı  $\text{A}'_{1-x}\text{A}''_x\text{MnO}_3$  perovskit manqanidləri üçün alınmış nəticələrlə müqaisə edilmişdir. Yüksək temperaturlar oblastunda dayanqlı sistemin müşahidə edilməsinin əsas səbəbi,  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşmələrinin kristal quruluşlarının yüksək simmetriyalı Pm-3m fəza qruplu kubik sinqoniyaya malik olması göstərilmişdir.

**Dördüncü fəsil** aşağı temperaturlarda  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal və maqnit quruluşlarının tədqiqinə həsr edilmişdir. Otaq temperaturundan  $T = 5$  K temperatura qədər alınmış neytron difraksiyası spektrlərinin müqaisəsi zamanı müəyyən edilmişdir ki, otaq temperaturunda müşahidə edilmiş quruluşlar aşağı temperaturlar oblastunda da saxlanılır və heç bir quruluş faza keçidi baş vermir.  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin otaq temperaturunda və normal şəraitdə alınmış neytronoqrammasında  $d_{hkl} = 3.6$  Å və 4.9 Å-da maksimumlar müşahidə edilmişdir ki, bu maksimumlar kristal quruluşa uyğun gəlməmişdir. Fullprof proqramında Ritveld metodu ilə aparılmış analiz nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, bu maksimumlar ferromaqnit quruluşa uyğun gəlir. Onların analizi nəticəsində Mn atomlarının maqnit momentlərinin qiymətləri müəyyən edilmişdir. Neytron difraksiyası spektrlərinin analizi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, aşağı temperaturlarda maqnit momentlərinin qiymətləri daha yüksək olmuşdur. Bu hadisə,

temperaturun təsiri ilə istilik rəqslərinin amplitudunun artması nəticəsində uzaq maqnit nizamlılığının qismən pozulması ilə əlaqələndirilmişdir.  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsində Mn atomlarının maqnit momentlərinin temperatur asılılıqları şəkil 2-də verilmişdir. Asılılıqdan görüldüyü kimi,  $T_C = 317 \text{ K}$  temperaturda ferromaqnit-paramaqnit faza keçidi baş vermişdir.



**Şəkil 2.  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsində maqnit momentlərinin temperatur asılılıqları.**

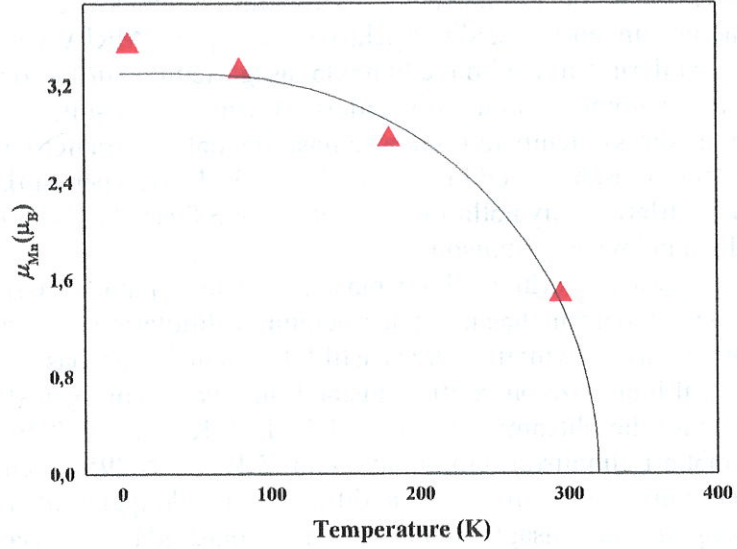
$\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin otaq temperaturunda və  $T = 5 \text{ K}$ -ə qədər aşağı temperaturda oblastında kristal quruluşu da tədqiq edilmişdir.  $d = 1.6-5.1 \text{ \AA}$  intervalında alınmış neytron difraksiyası spektrlərinin tədqiq edilməsi zamanı müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmənin kristal quruluşuna uyğun gələn difraksiya maksimumları  $d = 1.6-3.2 \text{ \AA}$  intervalına düşür. Təhlillərdən məlum olmuşdur ki, bu neytron difraksiyası spektri Pm-3m fəza qruplu kubik sinqoniyalı yüksək simmetriyalı perovskit quruluşuna uyğun gəlir. Aşağı temperatur neytronogrammalardan görünür ki, temperaturun qiyməti azaldıqca reflekslərdə absis oxu boyunca atom müstəviləri arasındakı məsafələrin daha kiçik qiymətlərinə tərəf sürüşmə baş vermişdir. Bu

da temperaturun azalması ilə atomlararası rabitələrin qiymətlərinin azalmasının göstəricisidir. Spektrlərin Fullprof, MRIA və VMRIA proqramlarından istifadə edilməklə aşağı temperaturlar oblastında qəfəs parametrlərinin qiymətləri təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, temperaturun azalması ilə qəfəs parametrlərində də azalma müşahidə edilmiş və  $T = 5$  K temperaturda qəfəs parametrlərinin qiymətlərinin:  $a = b = c = 3.8945 \text{ \AA}$ ,  $V = 59.068 \text{ \AA}^3$  olduğu müəyyən edilmişdir.

$\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin qəfəs parametrlərinin və elementar qəfəsin həcmnin temperatur asılılıqlarından görünür ki, temperaturun qiyməti artdıqca istilikdən genişlənmə baş vermişdir. Bu asılılığa nəzərən xətti genişləndirmə və həcmi genişləndirmə əmsalları hesablanmış və  $\alpha_a = 1.16 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ ,  $\alpha_V = 3.49 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  qiymətləri alınmışdır. Göründüyü kimi  $5 \text{ K} \leq T \leq 295 \text{ K}$  temperatur intervalında aparılmış neytron difraksiyası tədqiqatlarından məlum olmuşdur ki, aşağı temperaturlar oblastında  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsində quruluş faza keçidi baş verməmişdir. Göstərilən temperatur intervalında bu birləşmədə yüksək simmetriyalı kristal quruluş saxlanılmışdır.

Neytron difraksiyası tədqiqatları  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  tərkibləri üçün də alınmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmələrə uyğun difraksiya spektrlərində də ferromaqnit quruluşa uyğun gələn maksimumlar müşahidə edilir. Hər bir tərkib üçün maqnit momentlərinin qiymətlərinin temperatur asılılıqları alınmış, bu asılılıqların Brillüen funksiyası ilə interpretasiya edilməsi nəticəsində ferromaqnit – paramaqnit faza keçidlərinin qiymətləri müəyyən edilmişdir.  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsində Mn atomlarının maqnit momentlərinin temperatur asılılıqları şəkil 3-də verilmişdir.

Analiz nəticəsində müəyyən edilmişdir ki,  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsində Mn atomlarının maqnit momentlərinin qiymətləri bir qədər yüksək olur. Bu effekt, Küri temperaturunun qiymətlərində də aşkar edilmişdir. Şəkil 3-də verilmiş asılılıqdan görünür ki, bu birləşmədə ferromaqnit-paramaqnit faza keçidi temperaturu  $T_C = 322 \text{ K}$ -ə uyğun gəlir.



**Şəkil 3.  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsində maqnit momentlərinin temperatur asılıqları.**

$\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsinin otaq temperaturunda və  $T = 5$  K-ə qədər aşağı temperaturda neytron difraksiyası spektrləri analiz edilərək kristalloqrafik parametrləri təyin edilmişdir. Atom müstəviləri arasındakı məsafələrin  $d = 1.6-5.1$  Å intervalında alınmış spektrlərin tədqiq edilməsi zamanı müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmənin kristal quruluşuna uyğun gələn difraksiya maksimumları  $d = 1.6-3.2$  Å intervalına yerləşirlər. Otaq temperaturunda alınmış spektrlərin interpretasiyasından məlum olmuşdur ki, bu neytron difraksiyası spektri Pm-3m fəza qruplu kubik sinqoniyalı yüksək simmetriyalı ideal perovskit quruluşuna uyğun gəlir. Bu nəticələr əvvəlki tədqiqatlarımız zamanı  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün otaq temperaturunda və normal şəraitdə aparılmış rentgen difraksiyası təcrübələrindən alınmış nəticələrlə üst-üstə düşmüşdür. Elementar özəyin parametrlərinin qiymətləri:  $a = b = c = 3.9072$  Å,  $V = 59.65$  Å<sup>3</sup> müəyyən edilmişdir.  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsinin spektrlərində də  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsinin spektrlərində olduğu



kimi temperaturun qiyməti azaldıqca reflekslərdə absis oxu boyunca atom müstəviləri arasındakı məsafələrin daha kiçik qiymətlərinə tərəf sürüşmə baş vermişdir. Bu da temperaturun azalması ilə atomlararası rabitələrin qiymətlərinin azalmasının göstəricisidir.

Spektrlərin Fullprof, MRIA və VMRIA proqramlarından istifadə edilməklə analiz edilmişdir. Nəzəri olaraq yaradılmış əyrilərin təcrübi əyrilərlə müqaisəsi nəticəsində aşağı temperaturlar oblastında  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristalloqrafik parametrləri: atom koordinatları, atomlararası məsafələri, rabitələrarası bucaqları, sinqoniyası və fəza qrupu təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, temperaturun azalması ilə qəfəs parametrlərində də azalma müşahidə edilmiş və  $T = 5 \text{ K}$  temperaturda (helium temperaturunda) qəfəs parametrlərinin qiymətlərinin:  $a = b = c = 3.8963 \text{ \AA}$ ,  $V = 59.15 \text{ \AA}^3$  olduğu müəyyən edilmişdir.

Aşağı temperaturlar oblastında  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsinin qəfəs parametrlərinin temperatur asılılıqları alınmışdır. Asılılıqlardan müəyyən edilmişdir ki, temperaturun qiyməti artdıqca istilikdən genişlənmə baş verir. Bu asılılığa nəzərən xətti genişlənmə və həcmi genişlənmə əmsalları hesablanmışdır.  $\alpha_a = 0.96 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ , və  $\alpha_V = 2.91 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  qiymətləri alınmışdır.

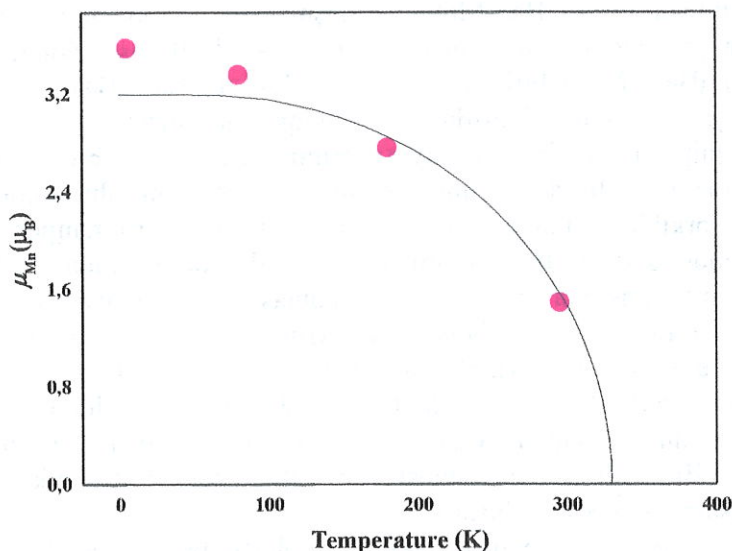
$\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşunun aşağı temperaturlar oblastında neytronoqrafiya metodu ilə tədqiqi zamanı alınmış nəticələrdən məlum olmuşdur ki, bu birləşmənin də qəfəs parametrləri  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  sistemində daxil olan  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  perovskit birləşmələrinin qəfəs parametrlərinin dəyişmə mexanizminə uyğun olaraq dəyişir. Lakin  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşmələrinin termik əmsallarından: xətti və həcmi istilikdən genişlənmə əmsallarından bir qədər fərqli qiymətlər alınmışdır ki, bu da temperatura qarşı bu sistemlərin daha dayanıqlı olmasının göstəricisidir. Bu tədqiqatlardan alınmış nəticələrlə  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  sistemində La atomlarının konsentrasiyası artdıqca daha yüksək simmetriyalı sistem formalaşması bir daha təsdiq edilmişdir. Ona görə də ilkin göstəricilərə görə  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsinin ferromaqnit xassələri daha güclü olmalı, Mn atomlarının maqnit momentlərinin qiymətləri daha yüksək qiymətlərə malik olmalıdır.

Lakin bu birləşmənin maqnit xassələri üçün daha dəqiq məlumatların əldə edilməsi üçün neytron difraksiyası spektrlərinin ferromaqnit quruluşu uyğun hesab edilən refleksləri analiz edilməli, alınmış məlumatların təhlili aparılmalıdır.

$\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  perovskit birləşməsinin maqnit xassələrinin də öyrənilməsi məqsədi ilə helium temperaturunda ( $T = 5-295$  K temperatur intervalında) aparılmış tədqiqatlar zamanı əldə edilmiş neytronoqrammalarda müşahidə edilmiş maqnit refleksləri analiz edilmişdir. Analizlər Ritveld metodu ilə Fullprof proqramından istifadə edilərək analitik üsulla aparılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki,  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsinin maqnit quruluşuna uyğun gələn reflekslər  $d = 3.5-5.1$  Å intervalında müşahidə edilir və maksimumların mərkəzi  $d = 3.65$  Å və  $d = 4.96$  Å nöqtələrinə düşür. Analiz nəticəsində müəyyən edilmişdir ki,  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsinin maqnit xassələri də  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşmələrinin maqnit xassələrinə uyğun gəlir. Otaq temperaturunda  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsi də ferromaqnit xassələrə malik birləşmədir.  $d = 3.65$  Å nöqtəsində müşahidə edilmiş refleksin intensivliyi az olsa da  $d = 4.96$  Å nöqtəsində müşahidə edilmiş refleksin intensivliyi kifayət qədər yüksəkdir. Aşağı temperaturlar oblastında temperaturun qiyməti azaldıqca ( $T = 5$  K-ə qədər) hər iki refleksin intensivliyində müəyyən qədər artma müşahidə edilmişdir ki, bu da birləşmənin kristal qəfəsində temperaturun təsiri ilə yaranan istilik rəqslərinin (optik və akustik rəqslərin) sönməsi hesabına uzaq maqnit nizamlılığının yaranması və buna uyğun olaraq Mn atomlarının maqnit momentlərinin qiymətlərinin yüksəlməsinin əlamətidir.

$T = 5-295$  K temperatur oblastında  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsində perovskit kubik qəfəsin düyünlərində  $\text{MnO}_6$  oktaedrlərinin tam mərkəzində dayanmış dördvalentli manqan atomlarının maqnit momentləri təyin edilmişdir.  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsində maqnit momentlərinin temperatur asılılığı şəkil 4-də verilmişdir. Ritveld metodu ilə spektrlərin analiz edilməsi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, otaq temperaturunda və normal şəraitdə dördvalentli manqan ( $\text{Mn}^{4+}$ ) atomlarının maqnit momentləri nisbətən aşağı qiymətə malik olurlar:  $\mu = 1.49$   $\mu\text{B}$ . Temperaturun

qiyməti azaldıqca maqnit momentlərinin qiymətlərində də artma müşahidə edilmişdir (şəkil 4).  $T = 180$  K temperaturda maqnit momentlərinin qiyməti artaraq:  $\mu = 2.76 \mu_B$ ,  $T = 80$  K temperaturda isə:  $\mu = 3.36 \mu_B$  qiymətinə malik olmuşdur.



**Şəkil 4.  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsində maqnit momentlərinin temperatur asılılıqları.**

Daha aşağı temperaturlarda neytron difraksiyası spektrində müşahidə edilmiş və ferromaqnit quruluşa uyğun gələn reflekslərin intensivliyində artma müşahidə edilmişdir. Analiz nəticəsində müəyyən edilmişdir ki,  $T = 5$  K temperaturda  $\mu = 3.58 \mu_B$  qiymətinə malik olmuşdur. Maqnit atomlarının temperaturdan asılı olaraq şəkil 4-də verilmiş qrafiki Brillüen funksiyası ilə interpolasiya edilmişdir. Maqnit momentinin temperatur asılılığından ferromaqnit – paramaqnit faza keçidinə uyğun gələn Kuri temperaturunun qiyməti müəyyən edilmişdir.  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün Brillüen funksiyasının absis oxu ilə kəsişmə nöqtəsi təyin edilmiş və Kuri temperaturu üçün  $T_C = 330$  K qiyməti alınmışdır.

$\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşmələrinin ferromaqnit xassələrinin müqaisəli analizinin aparılması zamanı aşkar edilmişdir ki, kristal quruluşun

simmetriyasının yüksəlməsinə uyğun olaraq tərkiblərdə lantan metal atomlarının konsentrasiyası artdıqca maqnit momentlərinin qiymətlərində də artma müşahidə edilir. Maqnit momentlərinin otaq temperaturunda alınmış qiymətlərində də bir qədər artma müşahidə edilmişdir.  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsində otaq temperaturunda maqnan atomlarının intensivliyi  $\mu = 1.40 \mu_B$  olduğu halda,  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün  $\mu = 1.47 \mu_B$ ,  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  üçün isə  $\mu = 1.49 \mu_B$  olmuşdur. Ferromaqnit quruluşda Mn atomlarının maqnit momentlərinin qiymətlərində yaranmış fərq, göstərilən temperatur oblastı boyunca bütün nöqtələrdə müşahidə edilmişdir. Bu tərkiblərin maqnit momentlərindəki fərq Kuri temperaturunun qiymətinə də təsir göstərmişdir. Bu tərkiblərdə lantan atomlarının maqnit xassələrinə malik olmamasına baxmayaraq, onların konsentrasiyası artdıqca  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  sistemində Kuri temperaturunun qiyməti artmışdır ki, bu da daha yüksək temperaturlarda ferromaqnit xassələrinin müşahidə edilməsi deməkdir. Tədqiqatlardan alınmış nəticələrdən görünür ki,  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsi də otaq temperaturunda maqnit xassələrə malik olan birləşmədir.

Aşağı temperaturlar oblastında  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu tədqiq edilmişdir.  $T = 5 \text{ K}$ -ə qədər aşağı temperaturlar oblastında alınmış neytron difraksiyası spektrlərinin analizi zamanı müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmənin kristal quruluşuna uyğun gələn difraksiya maksimumları  $d = 1.6\text{-}3.2 \text{ \AA}$  intervalına yerləşirlər. Otaq temperaturunda alınmış spektrlərin MRİA və VMRIA proqramlarında interpretasiyasından məlum olmuşdur ki, bu neytron difraksiyası spektri Pm-3m fəza qruplu kubik sinqoniyalı yüksək simmetriyalı ideal perovskit quruluşuna uyğun gəlir. Bu nəticələr əvvəlki tədqiqatlarımız zamanı  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün otaq temperaturunda və normal şəraitdə aparılmış rentgen difraksiyası təcrübələrindən alınmış nəticələrə uyğun gəlmişdir. Elementar özəyin parametrlərinin qiymətləri:  $a = b = c = 3.9049 \text{ \AA}$ ,  $V = 59.54 \text{ \AA}^3$  müəyyən edilmişdir.

Neytronoqrammalardan görünür ki,  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  perovskit birləşməsinin spektrlərində də  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  və  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşmələrinin spektrlərində olduğu kimi

temperaturun qiyməti azaldıqca reflekslərdə absis oxu boyunca atom müstəviləri arasındakı məsafələrin daha kiçik qiymətlərinə tərəf sürüşmə baş vermişdir. Bu da temperaturun azalması ilə atomlararası rabitələrin və buna uyğun olaraq qəfəs parametrlərinin qiymətlərinin azalmasının göstəricisidir.

Spektrlərin Fullprof, MRIA və VMRIA proqramlarından istifadə edilməklə analiz edilmiş və kristalloqrafik parametrlərin qiymətləri təyin edilmişdir. Nəzəri olaraq yaradılmış əyrilərin təcrübi əyrilərlə müqaisəsi nəticəsində aşağı temperaturlar oblastında  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsinin kristalloqrafik parametrləri: atom koordinatları, atomlararası məsafələri, rabitələrarası bucaqları, simmetriyası, nqoniyası və fəza qrupu təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, temperaturun azalması ilə qəfəs parametrlərində də azalma müşahidə edilmiş və  $T = 5$  K temperaturda (helium temperaturunda) qəfəs parametrlərinin qiymətlərinin:  $a = b = c = 3.8959 \text{ \AA}$ ,  $V = 59.13 \text{ \AA}^3$  olduğu müəyyən edilmişdir.

Aşağı temperaturlar oblastında  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsinin qəfəs parametrlərinin temperatur asılılıqları alınmış və bu asılılıqların interpretasiyası aparılmışdır.  $a$ ,  $b$  və  $c$  qəfəs parametrlərinin xətti genişlənmə əmsalı üçün  $\alpha_a = 0.79 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ , elementar qəfəsin  $V$  həcmnin istilikdən genişlənmə əmsalı üçün  $\alpha_V = 2.37 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  qiymətləri alınmışdır.

İstilikdən genişlənmə əmsallarının qiymətlərindən görüldüyü kimi lantan atomlarının artması ilə  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  sistemi birləşmələrinin kristal quruluşu daha dayanıqlı hala keçir və qəfəs parametrləri temperaturdan asılı olaraq daha az dəyişirlər. Məlumdur ki,  $\text{BaMnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu romboedrik simmetriyaya,  $\text{LaMnO}_3$  birləşməsinin kristal quruluşu kubik simmetriyaya malik olur. Ona görə də  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  bərk məhlullarında La metalının konsentrasiyası yüksəldikcə daha dayanıqlı kubik kristal quruluş formalaşmışdır.

Fəslin sonunda  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  sisteminin müxtəlif tərkibləri üçün alınmış maqnit xassələri müqaisə edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, tərkiblərdə La atomlarının konsentrasiyası artdıqca Mn atomlarının maqnit momentlərinin qiymətlərində artma baş vermişdir. Bu onunla əlaqədardır ki, daha böyük ion raiusuna malik

La atomlarının konsentrasiyası artdıqca kristal quruluşun simmetriyası daha da artmış və bunun nəticəsində Mn atomlarının uzaq nizamlılığı daha da güclənmişdir. Alınmış nəticələr  $A'_{1-x}A''_x\text{MnO}_3$  perovskit maqnitləri üçün maqnit xassələrin tədqiqi zamanı alınmış nəticələrlə müqaisə edilmişdir.

## NƏTİCƏ

1. Müəyyən edilmişdir ki,  $\text{La}_x\text{Ba}_{1-x}\text{MnO}_3$  ( $x = 0.5, 0.63, 0.78$ ) sistemin birləşmələri Fm-3m fəza qruplu yüksək simmetriyalı kubik perovskit quruluşa malikdir. Tərkibdə lantan atomlarının konsentrasiyası artdıqca qəfəs parametrlərinin qiymətlərində artma müşahidə edilmişdir ki, bu da ikivalentli  $\text{La}^{2+}$  və  $\text{Ba}^{2+}$  atomlarının ion radiusları arasındakı fərqlə izah edilmişdir.
2.  $T = 5-395$  K temperatur intervalında  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsində Mn atomlarının maqnit momentlərinin qiymətləri təyin edilmişdir. Göstərilmişdir ki, temperaturun təsiri artdıqca maqnit momentinin qiymətində ( $\mu_{5\text{K}} = 3.42 \mu_{\text{B}}$ -dən  $\mu_{295\text{K}} = 1.40 \mu_{\text{B}}$ -dək) azalma baş verir. Bu, istilik rəqsləri hesabına uzaq maqnit nizamlılığının pozulması ilə izah edilmişdir.
3.  $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün Kuri temperaturunun qiyməti müəyyən edilmişdir. Mn atomlarının maqnit momentlərinin temperatur asılılığının Brillüen funksiyası ilə interpretasiyası nəticəsində müəyyən edilmişdir ki,  $T = 317$  K temperaturda ferromaqnit-paramaqnit faza keçidi baş verir.
4. Aşağı temperaturlar oblastında ( $T = 5-395$  K)  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün qəfəs parametrlərinin temperatur asılılıqlarına əsasən istidən genişlənmə əmsalları hesablanmışdır. Göstərilən temperatur intervalında xətti genişlənmə əmsalı üçün:  $\alpha_a = 0.96 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ , həcmi genişlənmə üçün isə:  $\alpha_V = 2.91 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  qiymətləri müəyyən edilmişdir.
5.  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün aşağı temperaturlar oblastında ( $T = 5-395$  K) Mn atomlarının maqnit momentlərinin temperatur asılılığı alınmışdır. Müəyyən edilmişdir ki,  $T_C = 322$  K temperaturda maqnit momentlərinin qiyməti  $\mu = 0 \mu_{\text{B}}$  olur və ferromaqnit-paramaqnit faza keçidi baş verir.
6.  $T = 5-395$  K temperatur intervalında  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsində Mn atomlarının maqnit momentlərinin qiymətləri təyin edilmişdir. Temperaturun təsiri artdıqca maqnit momentinin qiymətində ( $\mu_{5\text{K}} = 3.58 \mu_{\text{B}}$ -dən  $\mu_{295\text{K}} = 1.49 \mu_{\text{B}}$ -dək) azalma baş vermişdir.  $T_C = 330$  K temperaturda ferromaqnit-paramaqnit faza keçidi baş vermişdir.

7. Aşağı temperaturlar oblastında ( $T = 5-395$  K)  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  birləşməsi üçün qəfəs parametrlərinin temperatur asılılıqlarından istidən genişlənmə əmsallarının qiymətləri hesablanmışdır. Göstərilən temperatur intervalı üçün xətti genişlənmə əmsalı üçün:  $\alpha_a = 0.79 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ , həcmi genişlənmə əmsalı üçün isə:  $\alpha_V = 2.37 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  qiymətləri müəyyən edilmişdir.

#### Dissertasiya mövzusu üzrə dərc olunmuş elmi işlər

1. Həşimov, R.F., Abiyev, Ə.S.  $\text{BaTiO}_3$  və  $\text{BaMnO}_3$  polikristallarının neytron difraksiyası ilə tədqiqi // I Respublika elmi konfransı "Gələcəyə addım", - Bakı: - 12-14 aprel, 2017, -s. 77-79.
2. Həşimov, R.F. First-Principles Calculations of the Electronic Structure and Density of States of Barium Manganate // International Conference Condensed Matter Research at the IBR-2, - Dubna - October 9-12, - 2017, - p.112.
3. Гашимов, Р.Ф., Аскеров, Э.Б., Труханов, А.В., Труханов, С.В., Микаилзаде, Ф.А., Бескровный, А.И. Кристаллическая и магнитная структуры  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  при низких температурах // ЛП Школа ПИЯФ и Молодежная конференция по физике конденсированного состояния, - Санкт-Петербург-12-17 марта, - 2018, - с. 19.
4. Hashimov, R.F. Electronic structure and density of states in hexagonal  $\text{BaMnO}_3$  / R.F. Hashimov, N.A. Ismayilova, F.A. Mikailzade [et al.] // Modern Physics Letters B, -2018. 32(17), -1850186 (1-7).
5. Hashimov, R.F. Structure and thermal analysis of  $\text{Ba}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{MnO}_3$  polycrystalline powder / R.F. Hashimov, Mikailzade, S.V. Trukhanov [et al.] // International Journal of Modern Physics B, -2019. 33(2), - p.1950244 (1-9).
6. Hashimov, R.F. Experimental investigation on thermodynamic properties and crystal structure of  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  compound / R.F. Hashimov, Mikailzade, S.V. Trukhanov [et al.] // International Journal of Modern Physics B, -2020. 34(1), - p.2050101 (1-7).



7. Hashimov, R.F. First-principles calculations of the electronic spectrum and the density of states of the  $\text{LaMnO}_3$  crystal // Advanced Physical Research, -2021. 3(1), - p.35-38.
8. Həşimov, R.F.  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  birləşməsində ferromaqnit-paramaqnit faza keçidi // – Bakı: AZTU, Elmi əsərlər, - 2021. №1, - s. 31-35.
9. Hashimov, R.F. X-ray study of the crystal structure of the compound  $\text{La}_{0.63}\text{Ba}_{0.37}\text{MnO}_3$  // – Bakı: AJP Fizika, -2022. XXVIII(1), - s. 35-37.
10. Hashimov, R.F. Structural analysis of  $\text{La}_{0.78}\text{Ba}_{0.22}\text{MnO}_3$  by X-ray diffraction // Condensed Matter Research at the IBR-2 International Conference, - Dubna:- April 25-29, 2022, -s. 113.
11. Həşimov, R.F. Aşağı temperaturlar oblastında  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$  sistemində ferromaqnit-paramaqnit faza keçidləri // Gənc Tədqiqatçı, -2022, VIII(1), -s. 13-16.



Dissertasiyanın müdafiəsi 20 oktyabr 2023-cü il tarixində saat 14<sup>00</sup> -da Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya Şurasının iclasında keçiriləcək.

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

Dissertasiya ilə Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutunun kitabxanasında tanış olmaq mümkündür.

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

Avtoreferat 18 sentyabr 2023- cü il tarixində zəruri ünvanlara göndərilmişdir.

Çapa imzalanıb: 15.09.2023  
Kağızın formatı: A5  
Həcm: 39419 işarə  
Tiraj: 100