

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

Əlyazması hüququnda

Ag-A^{IV}(Ge,Sn,Pb)-Se VƏ Ag-Pb-Te SİSTEMLƏRİNDƏ FAZA TARAZLIQLARININ TERMODİNAMİKASI VƏ 3D MODELLƏŞDİRİLMƏSİ

İxtisas: 2303.01 – Qeyri-üzvi kimya

Elm sahəsi: Kimya

İddiaçı: **Fidan Samir qızı İbrahimova**

Fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi
almaq üçün təqdim edilmiş dissertasiyanın

AVTOREFERATI

Bakı-2021

Dissertasiya işi AMEA-nın akademik Murtuza Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun "Mineral xammalın kompleks emalı" şöbəsində və "Kvant Kompüter və Spintronika üçün Qabaqcıl Materiallar" Beynəlxalq laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir

Elmi rəhbər:

k.e.d., professor

Asif Nəsim oğlu Məmmədov

Rəsmi oponentlər:

k.e.d., professor

İmir İlyas oğlu Əliyev

k.e.d., professor

Teymur Məmməd oğlu İlyaslı

k.ü.f.d., dosent

Mahmud Rüstəm oğlu Allazov

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Ali Attestasiya Komissiyasının AMEA-nın akademik Murtuza Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.15 Dissertasiya şurası

Dissertasiya şurasının sədri:

k.e.d., akademik

Dilqəm Bəbir oğlu Tağıyev

Dissertasiya şurasının

elmi katibi:

k.ü.f.d., dosent

Ülviyyə Əhməd qızı Məmmədova

Elmi seminarın sədri:

k.e.d., professor

Akif Şıxan oğlu Əliyev

İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

Mövzunun aktuallığı və işlənmə dərəcəsi. Üç komponentli sistemlərin faza diaqramları fəza quruluşuna malikdir. Buna görə də üçlü sistemlərin faza diaqramlarının 3D modelləşdirilməsi üsullarının işlənməsi aktual məsələdir. Müasir kompüter proqramlarının hamısı 3D modelləşmə məsələlərini həll edir. Bu proqramların ümumi cəhəti budur ki, əşyanın fəza koordinatları matrisalar şəklində sistemləşdirilir və matrisalar əsasında obyektin 3D görüntüsü yaranır. Analitik üsullarda monovariant tarazlıq xətləri və bivariant tarazlıq səthlərinin temperatur (və ya təzyiq) və tərkib koordinatları riyazi funksiyalarla ifadə edilir. Hal diaqramının üç ölçülü koordinatda analitik modeli tarazlıqda olan fazaların vəziyyətini müxtəlif bucaqlardan müşahidə etməyə, 3D görüntünün 2D proyeksiyalarını almağa, faza diaqramının koordinatlarını cədvəlləşdirməyə imkan verir. Lakin üç komponentli sistemlərin faza diaqramlarının analitik üsulla 3D modelləşməsinə həsr olunmuş işlər çox azdır.

Dissertasiya işində tədqiqat obyektləri olaraq $Ag-A^{IV}(Ge,-Sn,Pb)-Se$, $Ag-Pb-Te$ sistemləri götürülmüşdür. Gümüş, germanium, qalay və qurğuşunun xalkogenidləri elektron texnikası üçün elektrokimyəvi sensor, elektrod və super keçiriciliyə malik bərk elektrolitlər kimi perspektiv materiallardır.

Gümüş, germanium, qalay, qurğuşun və xalkogen tərkibli üçlü sistemlərin hal diaqramları fazaların yarımkeçirici təbiəti ilə əlaqədar olaraq XX əsrin 60 -cı illərindən tədqiq edilir. Son 5-10 ildə $Ag-A^{IV}(Ge, Sn, Pb)-Se$, $Ag-Pb-Te$ sistemlərinin faza diaqramlarının dəqiqləşdirilməsinə və aralıq fazaların termodinamik parametrlərinin təyininə yönəlmiş işlər geniş vüsət almışdır. Bununla yanaşı bu sistemlərin faza diaqramlarının analitik 3D modelləşməsi reallaşdırılmamışdır.

Tədqiqatın məqsədi ümumi xalkogenid anionu olan üçkomponentli sistemlərin faza diaqramları və termodinamiki funksiyalarının analitik üsulla 3D modelləşməsi üsulunun işlənməsi və $Ag-A^{IV}(Ge,Sn,Pb)-Se$, $Ag-Pb-Te$ sistemlərində sınaqmasıdır.

Tədqiqatın vəzifələri:

- ❖ İki və üç komponentli gümüş, germanium, qalay, qurğuşunun selenidləri, gümüş və qurğuşunun telluridlərinin termodinamiki funksiyaları və faza diaqramlarının analizi və etibarlı məlumatın sistemləşdirilməsi.
- ❖ Likvidusun və təbəqələşmə səthlərinin hüdudlarının, uçucu komponentlər olan iki atomlu selen və tellurun doymuş buxar təzyiqinin hesablanması və analitik 3D modelləşməsi üçün tənliklərin alınması
- ❖ Ag-Ge-Se, Ag-Sn-Se, Ag-Pb-Se(Te) sistemlərinin termodinamiki trianqulyasiyası, əlavə təcrübələrdən istifadə etməklə mono-, nonvariant tarazlıqlarının koordinatlarının dəqiqləşdirilməsi və modelləşdirilməsi, Ag-Pb-Se(Te) sistemlərində P-T-x tarazlıqlarının təyini və modelləşdirilməsi
- ❖ İkili və üçlü birləşmələrin kristallaşma səthlərinin və maye ərintilərin təbəqələşmə sahələrinin bir qrafikdə 3D modellərinin görüntülənməsi məsələsinin həlli.

Tədqiqatın metodları.

Dissertasiya işi Ag-A^{IV}(Ge,Sn,Pb)-X(S,Se,Te) sistemlərinin AMEA-nın müxbir üzvü Məhəmməd Babanlının ümumi rəhbərliyi ilə Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutu və Gəncə Dövlət Universitetində aparılan kompleks fiziki-kimyəvi tədqiqatının bir hissəsidir. Fiziki-kimyəvi tədqiqat üsulları olaraq DTA (Netzsch 404 F1 Pegasus system),RFA (Difraktometr D8 Advance, Bruker firması, CuK α 1-şəalanma) və doymuş buxar təzyiqini ölçmək üçün kvars membran-sıfır manometrindən istifadə olunmuşdur.

Ag-A^{IV}(Ge,Sn,Pb)-Se и Ag-Pb-Te sisteminin çox böyük həcmli təcrübi tədqiqat işlərində qismən iştirak etmişəm, bununla yanaşı elmi əsərlərdəki həmmüəlliflərim məni faza tarazlıqlarına aid təcrübi nəticələrlə təmin etmiş və bu məlumatdan mono-, non və bivariant tarazlıqların koordinatlarının təyində, izotermik kəsikləri qurmaqda, faza diaqramlarının trianqulyasiyasında, termodinamiki analiz və modelləşmədə istifadə etmişəm.

Nəzəri tədqiqat üsulları olaraq faza tarazlığı termodinamikasının klassik riyazi aparatının analitik versiyasından, requlyar məhlulların asimmetrik modelindən və bərk halın kvant kimyası təsəvvürlərindən istifadə edilmişdir. Hesablamalar və analitik modelləşmələr OriginLab, Grafikus.ru, www.matematikam.ru computer proqramları vasitəsi ilə aparılmışdır.

Müdafiəyə təqdim olunur:

Ümumi selenid və tellurid anionu olan üçlü sistemlərdə mono- və bivariant tarazlıqların termodinamiki analitik hesablanması və 3D modelləşməsi üsulu;

İki və üç komponentli gümüş, germanium, qalay, qurğuşunun selenidləri, gümüş və qurğuşun telluridlərinin dəqiqləşdirilmiş termodinamiki parametrləri (standart entropiya, istilik tutumu, əmələgəlmə entropiyası, entalpiya və Gibbs enerjisi);

Ag-Pb-Se(Te) sistemlərinin T-x-y və P-T-x faza diaqramları və onların analitik 3D modelləri.

Tədqiqatın elmi yeniliyi.

Üçlü sistemin iki komponentli sərhəd sistemlərinin faza diaqramlarından alınan informasiyaya əsaslanan yeni tənliklər alınmışdır;

Bərk halın kvant kimyası təsəvvürlərinə əsasən Debay funksiyasından istifadə etməklə Ag_8GeSe_6 və Ag_8SnSe_6 birləşmələrinin molyar istilik tutumu və standart entropiyası hesablanmışdır;

Ümumi selenid və tellurid anionları olan $Ag-A^{IV}(Ge,Sn,Pb)-Se$, Ag-Pb-Te sistemlərində likvidus və təbəqələşmə səthlərinin, uçucu selen və tellurun doymuş buxar təzyiqinin 3D computer modelləşməsi və 2D proyeksiyanması reallaşdırılmışdır;

İlk dəfə olaraq Ag-Pb-Se və Ag-Pb-Te sistemlərində n-tip (PbSe-Pb) və p-tip (PbSe-Se) qurğuşun selenidin və n-tip (PbTe-Pb) və p-tip (PbTe-Te) qurğuşun telluridin kristallaşma səthi üzrə P(təzyiq)-T(temperatur)-X(tərkib) diaqramları təyin edilmişdir.

Tədqiqatın nəzəri və praktiki əhəmiyyəti.

İşdə qeyri-üzvi kimyanın aktual məsələlərindən birinin yeni həlli– ümumi anionlu qeyri-üzvi üçlü sistemin faza diaqramlarının və termodinamik funksiyalarının 3D modelləşməsinin analitik həlli işlənmişdir.

2D və 3D analitik ifadələrin hər biri uyğun olaraq $100 \times 100 = 10\,000$ və $50 \times 50 = 2500$ matrisa cədvəllərini özündə saxlayır. Bu informasiya Ag-Ge-Se, Ag-Sn-Se, Ag-Pb-Se(Te) sistemlərində maye və buxar fazadan bərk fazanın alınmasının temperatur, təzyiq və tərkib parametrlərini optimallaşdırması üçün istifadə oluna bilər.

Dissertasyada işlənmiş faza diaqramlarının analitik 3D modelləşməsi üsulu magistrlər üçün yazılmış dərsliklərə daxil edilmiş (avtoreferat ədəbiyyat siyahısı 1,2,3,6,8,9 işlərinə istinadla) və tədrisdə istifadə olunur: Dilqəm Tağıyev, Manaf Manafov, Asif Məmmədov. Kimyada informasiya texnologiyalarının tətbiqi. 2018; Dilqəm Tağıyev, Asif Məmmədov. Gələcəyin kimyası. 2019.

İşin aprobeşiyası. Dissertasiyanın nəticələri aşağıdakı konfransların proqramına daxil edilmiş və müzakirə olunmuşdur: XXI International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia (RCCT–2017). 26-30 June 2017. Akademgorodok. Novosibirsk.; THERMAM 2018. 7th Rostocker International Conference: “Thermophysical Technical Thermodynamics” 26 - 27 July 2018, Rostock, Germany; THERMAM 2019. 6th Thermophysical and mechanical properties et advanced materials; 22-24 september, 2019. Çeşme-Izmir/Turkey, AMEA M.Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun 80 illiyinə həsr olunmuş konfrans. Bakı, 2016; Müasir kimya və biologiyanın aktual problemləri. Beynəlxalq elmi konfrans 12-13 may 2016-cı il. Gəncə; Heydər Əliyevin anadan olmasının 95-ci ildönümünə həsr olunmuş tələbə və gənc tədqiqatçıların “Gənclər və elmi innovasiyalar” mövzusunda Respublika Elmi-texniki konfrans. AzTU, 3-5 may 2018. Bakı.

Nəşr olunmuş əsərlər. Dissertasiya mövzusunə aid 16 iş, o cümlədən 7 jurnal məqaləsi, 9 konfrans materialı (1 məqalə və tezislər) çap olunmuşdur.

Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilat. Dissertasiya işi AMEA-nın akademik Murtuza Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunda yerinə yetirilmişdir.

İşin həcmi. Dissertasiya giriş, 6 fəsil, 11 cədvəl, 44 şəkil, nəticələr, 170 adda istifadə olunmuş ədəbiyyat siyahısından ibarət olub, 139 səhifə həcmə malikdir. Fəsil, mündəricat və giriş 44000 şərti işarədən(22 səh.), fəsil 2, 34000 şərti işarədən(17 səh.), fəsil 3, 19000 şərti işarədən(9.5 səh.), fəsil 4, 12000 şərti işarədən(6 səh.), fəsil 5, 24000 şərti işarədən(12 səh.), fəsil 6 və nəticələr, 27 000 şərti işarədən(13.5 səh.), cəmi 160 000 şərti işarədən (80 səh.) ibarətdir.

İŞİN MƏZUNU

Girişdə mövzunun aktuallığı, məqsədi, həll edilən məsələlər əsaslandırılır, müdafiəyə çıxarılan müddəalar, elmi yeniliklər, işin elmi və praktiki əhəmiyyəti təqdim edilir.

Birinci fəsil üç komponentli $Ag-A^{IV}(Ge,Sn,Pb)-Se$, $Ag-Pb-Te$ sistemlərinin və onların ikili $Ag(Ge,Sn,Pb)-Se(Te)$, $Ag-Ge,Sn,Pb$ sərhəd sistemlərinin T-X-Y və P-T-X faza diaqramlarının, termodinamiki funksiyalarının və aralıq fazalarının xassələrinin ədəbiyyat materiallarının təhlilinə həsr olunmuşdur. Ədəbiyyat materialının analizindən məlum olur ki, üçlü sistemlərin faza diaqramları və aralıq fazaların termodinamiki tədqiqinə həsr olunmuş işlərdəki bəzi məlumatlar ziddiyyətlidir. Buna görə də, bu məlumatları 3D modelləşdirmənin analitik metodları da daxil olmaqla müasir termodinamik hesablama və modelləşdirmə metodlarından istifadə etməklə əlavə təcrübələr ilə dəqiqləşdirmək vəzifəsi qoyulur.

İkinci fəsildə nəzəri və təcrübi tədqiqat metodları – faza diaqramlarının hesablanması və modelləşdirilməsi üçün termodinamiki - analitik üsullar müzakirə olunur. Məsələn 1-2-3 sisteminin 1 komponentinin likvidus səthinin hesablanması və modelləşdirilməsi üçün tənlik aşağıdakı formada olur:

$$T_{1(123)} = \left\{ \Delta H_1^m + y_{2(23)} [\Delta \bar{G}_{1(12)}^{exs}]_{x(1)} + y_{3(23)} [\Delta \bar{G}_{1(13)}^{exs}]_{x(1)} + a_1 x_1 (1 - x_2) y_{2(23)} (1 - y_{2(23)}) \right\} / (\Delta S_1^m - R \ln x_1) \quad (1)$$

Burada, $y_{2(23)}=x_2/(x_2+x_3)$, $y_{3(23)}=x_3/(x_2+x_3)$, x_1 , x_2 и x_3 – 1, 2 və 3 komponentlərinin mol payı, $\Delta H_1^m, \Delta S_1^m$ -1 maddəsinin molyar ərimə entalpiyası və entropiyası, $R=8.314$ C/(mol.K), $\Delta \bar{G}_{1(12)}^{exs}$ и $\Delta \bar{G}_{1(13)}^{exs}$ - 1 komponentinin parsial molyar izafi Gibbs enerjiləridir. Bu kəmiyyətlər 1-2 və 1-3 ikikomponentli sərhəd sistemlərinin likvidusunun koordinatlarına, a_1 parametri üç komponentli sistemin təcrübi qiymətlərinə əsasən hesablanır. Maye ərintilərin təbəqələşməsinin həddlərini təyin etmək requlyar məhlullar modelinin asimmetrik variantından:

$$\Delta G_T^0 = [a + b(1 - x)^2](1 - x)x + RT[x \ln x(1 - x) \ln(1 - x)] \quad (2)$$

və fazaların daxili termodinamiki stabillik şərtindən istifadə olunmuşdur:

$$(\partial^2 \Delta G^0 / \partial x^2)_{P,T} = -2*(a+b*x^2+2*b*x*(x-1)+b*x*(3*x-1))+ 8.31*T/(1-x)+8.31*T/x \quad (3)$$

Tədqiq olunan üçlü sistemlərin termodinamiki trianqulyasiyası üçün ikili və üçlü birləşmələrin iştirakı ilə gedən reaksiyaların sərbəst enerjisinin temperaturdan asılılığı Ulix tənliyi ilə müəyyən edilmişdir:

$$\Delta G_T^0 = \Delta H_T^0 - T \Delta S_{298}^0 - \Delta C_{P,298}^0 T \left[\ln \left(\frac{T}{298} \right) + \frac{298}{T} - 1 \right] \quad (4)$$

Fazaların kristallaşma səthlərinin 3D modelləşdirilməsi üçün bu tənlikdən istifadə edilmişdir:

$$T_{1(1-2-3)} = y T_{1(1-2)}(x_1) + (1-y) T_{1(1-3)}(x_1) + a x_1 (1-x_1)^2 y (1-y) \quad (5)$$

Burada, $y=x_2/(x_2+x_3)$, $1-y=x_3/(x_2+x_3)$, x_1 , x_2 və x_3 – komponentlərin mol payıdır; $T_{1(1-2)}$ və $T_{1(1-3)}$ – 1-2 и 1-3 sistemlərinin likvidus temperaturlarının tərkibdən asılılıq funksiyalarıdır. Üçlü sistemdə 1-2-3 monovariant tarazlıqların səthlərinin 3D modelləşdirilməsi üçün

temperaturun tərkibdən asılılıqları $T = f(x, y)$ funksiyası şəklində müəyyən edilir, burada x bazis seçilmiş komponentin mol payıdır. Dissertasiyada əsas komponent metallarla birləşmə əmələ gətirən xalkogen (selen və ya tellur) seçilmişdir. Gümüş ilə germanium, qalay, qurğuşun arasında zəif qarşılıqlı təsir (5) tənliyinin axırıncı – üçüncü üzvü ilə təyin edilir.

İkinci fəsildə, həmçinin $Ag-A^{IV}$ (Ge, Sn, Pb) -Se və Ag-Pb-Te sistemlərinin üçlü ərintilərinin vakuumlaşdırılmış kvars ampulalarda ilkin ikili birləşmələrdən və elementar komponentlərdən sintezi üsulu qısa formada təsvir edilmişdir. Uçucu komponentlərin doymuş buxar təzyiqinin təyini üsulları təhlil edilir. Selen və tellurun ikiatomlu molekullarının doymuş buxar təzyiqinin bir, dörd, altı atomlu selen və tellur molekullarının, həmçinin qurğuşun, qalay və germanium selenidləri və telluridlərin doymuş buxar təzyiqindən bir neçə tərtib yüksək olması səbəbindən, işdə kvars sıfır-membran manometrinə əsaslanan statik metoddan istifadə edilmişdir.

Üçüncü fəsildə Ag_8GeSe_6 və Ag_2GeSe_3 üçlü birləşmələrinin termodinamiki dayanıqlılığının qiymətləndirilməsi üçün Debay üsulundan istifadə edərək əlavə termodinamik hesablamalar aparılmış və Ag-Ge-Se üçlü sisteminin trianqulyasiyası yerinə yetirilmişdir. α - Ag_8GeSe_6 birləşməsinin istilik tutumu üçün etibarlı məlumat olmadığından bu kəmiyyət Debay üsulu ilə hesablanmışdır. Bu üsulda, birləşməni əmələ gətirən elementlərin xarakteristik temperaturlarından, həmçinin elementlərin və birləşmələrin ərimə temperaturlarından istifadə edilir:

$$\theta_D^* = \theta_D (T^{m*}/T^m)^{1/2} \quad (6)$$

Burada θ_D^* , θ_D – elementin birləşmədə və bəsit maddə halında xarakteristik temperaturu; T^{m*} , T^m – birləşmənin və bəsit maddənin ərimə temperaturları. θ_D^*/T parametrinə əsasən birləşmənin hər bir komponenti üçün molyar izoxor istilik tutumunun (C_v) payı tapılır, sonra isə Neyman-Kopp qaydasına əsasən bu kəmiyyətlər əsasında Ag_8GeSe_6 birləşməsinin molyar istilik tutumu hesablanır. İzoxor istilik tutumunun izobar istilik tutumuna hesablanması Maqnus-

Lindeman tənliyi vasitəsi ilə aparılmışdır. $C_{P,298}(\alpha\text{-Ag}_8\text{GeSe}_6)=377.1$ C/(mol.K) kəmiyyəti $\alpha\text{-Ag}_8\text{GeSe}_6$ birləşməsinin sərbəst enerjisinin temperatur asılılığında istifadə olunmuşdur.

$\alpha\text{-Ag}_8\text{GeSe}_6$ birləşməsinin entropiyasının ədəbiyyat qiymətlərində fərqlənmələr olduğundan bu kəmiyyət Istmen-Saqareyşvilinin Debay temperatur funksiyalarına əsaslanan tənliyi ilə qiymətləndirilmişdir:

$$S_{298}^0 = 0.75nR \left\{ \ln \left[\frac{200(M/n)^{5/3}}{\rho^{2/3}T^m} \right] \right\}^{4/3} \quad (7)$$

$n = 15$ – molekulda atom sayı, $R = 8.31$ C.mol⁻¹.K⁻¹, $M = 1410$ – molyar kütlə, $T^m = 1175$ K və $\rho = 6.21$ q.sm⁻³ Ag_8GeSe_6 birləşməsinin ərimə temperaturu və sıxlığıdır. Hesablama nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, $\alpha\text{-Ag}_8\text{GeSe}_6$ birləşməsinin standart entropiyası: $S_{298}^0(\text{Ag}_8\text{GeSe}_6)=711.6$ C.mol⁻¹.K⁻¹. Bu qiymət ədəbiyyatdakı elektrik hərəkət qüvvəsi üsulu ilə təyin edilmiş qiymətə uyğundur: 714.1 C.mol⁻¹.K⁻¹ [Moroz M.V., Prokhorenko M.V. Russ. J.Electrochem. 2015. №7. p. 697].

Termodinamiki hesablamalara əsasən Ag-Ge-Se sisteminin trianquilyasiyası yerinə yetirilmişdir. Ag-Ge-Se üçlü sistemində bir konqruyent əriyən Ag_8GeSe_6 birləşməsi alındığına görə bu sistem üç tərtibli matrisalar vasitəsi ilə 6 kvaziüçlü sistemə bölünmüşdür: Ag-Ag₂Se-Ag₈GeSe₆, Ag₂Se-Ag₈GeSe₆-Se, Ag₈GeSe₆-GeSe₂-Se, Ag₈GeSe₆-GeSe₂-GeSe, GeSe-Ag₈GeSe₆-Ge, Ag₈GeSe₆-Ag-Ge. GeSe₂ və Ag₈GeSe₆ və Ag₂Se birləşmələrinin likvidus səthlərinin və maye ərintilərin təbəqələşməsinin həuddlarının analitik 3D modelləri işlənmişdir (tənlik 8-12, şəkil 1).

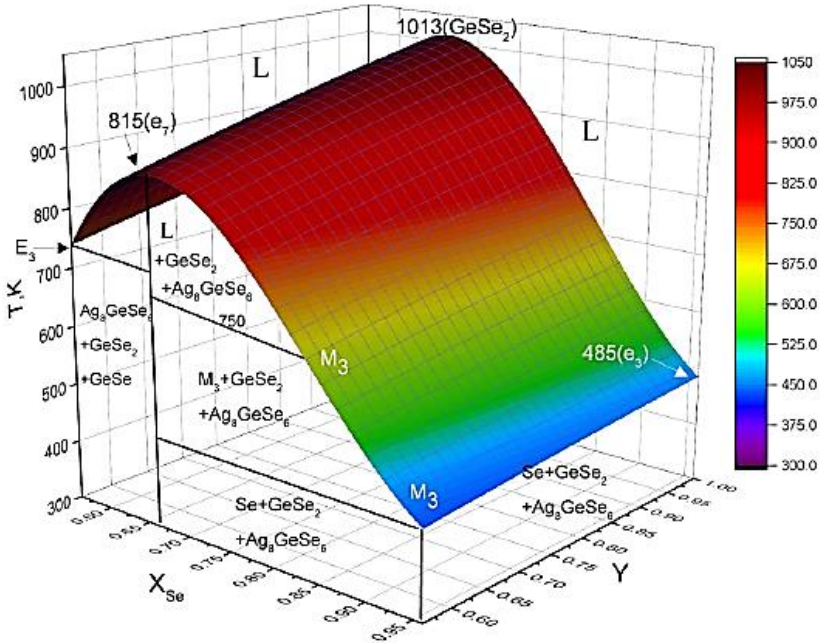
GeSe₂-nin kristallaşma səthi (8) tənliyinə əsasən modelləşdirilmişdir (tənliklər kompüter versiyalarında təqdim olunur):

$$T, K(\text{GeSe}_2) = (-12876 + 52474 * x - 65385 * x^2 + 25965 * x^3) * Y^{0.333} + 273 \quad (8)$$

Ag₂Se və Ag₈GeSe₆ birləşmələrinin ilkin kristallaşma səthləri aşağıdakı tənliklərlə ifadə olunmuşdur:

$$T, K(Ag_8GeSe_6) = (53 + 215*y - 657*y^2 + 496*y^3) * x^3 * (1-x)^3 * 1000 + 273 \quad (9)$$

$$T, K(Ag_2Se) = (-477852*x^3 + 875875*x^2 - 531117*x + 107285) * (1-y)^{0.6} + 273 \quad (10)$$



Şəkil 1. GeSe₂ birləşməsinin GeSe₂-Ag₈GeSe₆ kəsiyi ətrafında likvidus səthinin 3D görüntüsü. Görüntülənmə (8) tənliyi vasitəsi ilə yerinə yetirilmişdir.

İkili alt sistemlərin Ag-Ag₂Se ($x, Se = 0.12 \div 0.3$) və Ge-GeSe ($x, Se = 0.12 \div 0.4$) sahələrindən başlayan təbəqələşmənin həddlərinin 3D modelləri (11,12) tənlikləri ilə ifadə olunmuşdur:

$$T, K = (-4057 + 104175*x - 753245*x^2 + 2.40816*10^6*x^3 - 2.87183*10^6*x^4) * (1-y) \quad (11)$$

$$x, Se = 0.12 \div 0.3; y = x_{Ge} / (x_{Ag} + x_{Ge}) = 0 \div 0.25$$

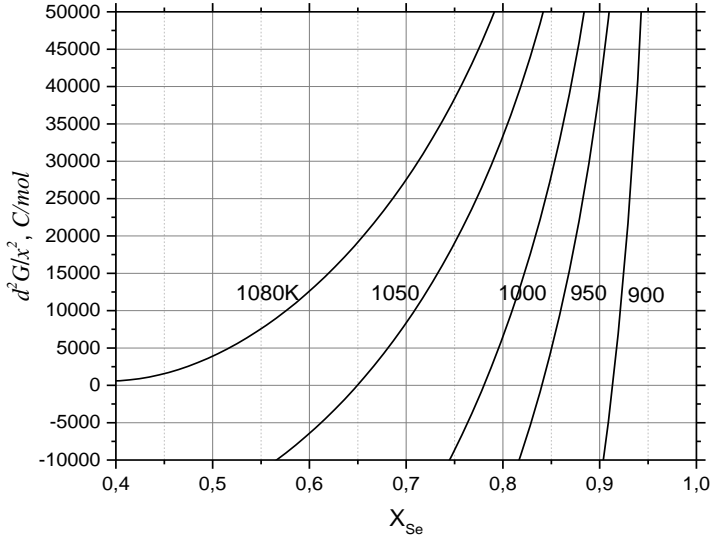
$$T, K = (-300 + 23268 * x - 123359 * x^2 + 301913 * x^3 - 289638 * x^4) * y^{0.265} \quad (12)$$

$$x, Se = 0.12 \div 0.4; y = x_{Ge} / (x_{Ag} + x_{Ge}) = 0.25 \div 1$$

Dördüncü fəsil Ag-Sn-Se sisteminin T-x-y diaqramının termodinamik təhlili və 3D modelləşdirilməsinə həsr edilmişdir. Gümüş, qalay selenidlərinin və üçlü birləşmələrin standart termodinamik funksiyaları ilə bağlı ədəbiyyat məlumatlarının uyğunsuzluğu səbəbindən gümüş, qalay selenidlərinin və Ag_8SnSe_6 , $Ag_{0.84}Sn_{1.16}Se_2$ və $AgSnSe_2$ birləşmələrinin entalpiyası, entropiyası, Gibbs əmələ gəlmə sərbəst enerjisi və istilik tutumu üçün müqayisəli təhlil aparılmış və ən etibarlı qiymətlər seçilmişdir. Bu məlumat gümüş-qalay-selen sisteminin termodinamiki trianqulyasiyası üçün istifadə olunmuşdur. Ag-Sn-Se sisteminin Ag-Se və Sn-Se yan sistemlərində qatılıq üçbucağının içərisinə tərəf yayılan geniş təbəqələşmə sahələri mövcuddur. Təbəqələşmə sahələrinin sərhədlərini təyin etmək üçün daxili stabilliyin termodinamiki şərtindən $(\partial^2 \Delta G^0 / \partial x^2)_{P,T} > 0$ istifadə edilmişdir. Gibbs enerjisinin ikinci törəməsi aşağıdakı ifadəyə malikdir:

$$(\partial^2 \Delta G^0 / \partial x^2)_{P,T} = -2 * (a + b * x^2 + 2 * b * x * (x-1) + b * x * (3 * x - 1)) + 8.31 * T / (1-x) + 8.31 * T / x \quad (13)$$

Termodinamiki stabillik funksiyası (13) qeyri-səlis sistem mövqelərinə əsaslanan requlyar məhlulların asimmetrik modelindən istifadə edilərək həll edilmişdir. (13) funksiyasının 900, 950, 1000, 1050 və 1080K temperaturlarında asılılıqları şəkil 2-də verilmişdir.



Şəkil 2. Gibbsin daxili stabililik funksiyasının Ag-Se sisteminin maye ərintiləri üçün $x_{Se} = 0.45 \div 0.95$ tərkibləri aralığında selenin mol payından asılılığı. (Qrafikdəki asılılıqların analitik ifadələri aşağıda verilmişdir):

$$-2*(16000-10000*x^2-2*10000*x*(x-1)-10000*x*(3*x-1))+8.31*1080/(1-x)+8.31*1080/x$$

$$-2*(25000-10000*x^2-2*10000*x*(x-1)-10000*x*(3*x-1))+8.31*1050/(1-x)+8.31*1050/x$$

$$-2*(40000-12000*x^2-2*12000*x*(x-1)-12000*x*(3*x-1))+8.31*1000/(1-x)+8.31*1000/x$$

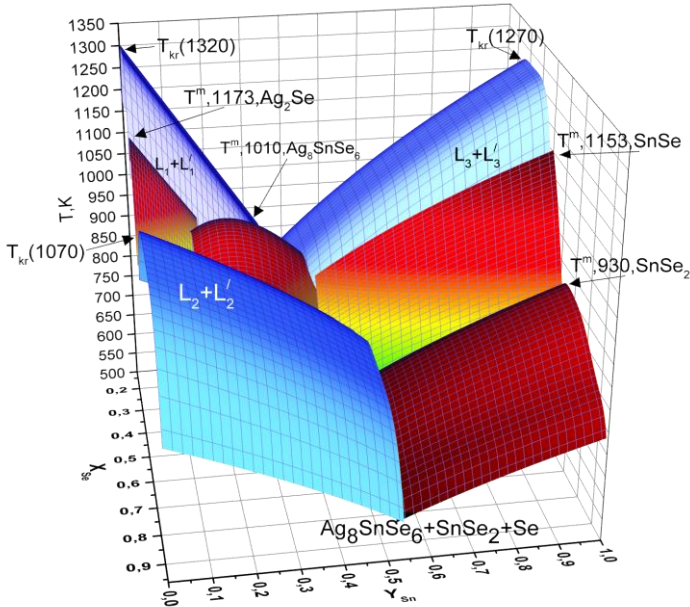
$$-2*(50000-12000*x^2-2*12000*x*(x-1)-12000*x*(3*x-1))+8.31*950/(1-x)+8.31*950/x$$

$$-2*(70000-10000*x^2-2*10000*x*(x-1)-10000*x*(3*x-1))+8.31*900/(1-x)+8.31*900/x$$

Termodinamiki hesablamalar nəticəsində məlum oldu ki, Ag-Se sistemində maye ərintilərin təbəqələşməsinin böhran temperaturu $T = 1080$ K-dir. Bu temperaturda $X_{Se} = 0.45 \div 0.95$ mol payı aralığında daxili sabillik funksiyası sıfırdan böyükdür ($\partial^2 \Delta G^0 / \partial x^2$)_P, $T > 0$ (Şəkil 2). Təbəqələşmə səthinin sərhədinin tərkibinin temperaturdan asılılığı aşağıdakı tənliklə approksimasiya olunmuşdur:

$$T, K = -6887.39418 + 42972.06249 * x - 87204.80219 * x^2 + 79466.09268 * x^3 - 27593.75741 * x^4$$

Ag-Sn-Se üçlü sistemin məhdud sayda DTA məlumatlarına əsasən və $Ag_2Se - SnSe$ və $Ag_2Se - SnSe_2$ kəsiklərinin hal diaqramlarına əsasən bivariant tarazlıq səthlərinin 3D modelləşdirilməsi üçün (şəkil 3) analitik funksiyalar müəyyən edilmişdir (14-20 tənlikləri).



Şəkil 3. Ag_2Se , $SnSe_2$, $SnSe$, Ag_8SnSe_6 birləşmələrinin likvidus və maye ərintilərin təbəqələşmə səthlərinin Ag-Sn-Se sistemində multi 3D modeli (14-20 tənlikləri). Tənliklər OriginLab kompüter proqramının analiz funksiyası vasitəsi ilə görüntülənmişdir.

Ag₂Se birləşməsinin kristallaşma səthinin (x=0.31÷0.42; y=0÷0.16) analitik ifadəsi:

$$T,K= (107558-531117*(1-x)+875875*(1-x)^2-477852*(1-x)^3)*(1-y)^{1.06} \quad (14)$$

SnSe birləşməsinin kristallaşma səthinin (x=0.5÷0.61; y=0.36÷1) analitik ifadəsi:

$$T,K= (349+4829*x-6436*x^2)*y^{0.28} \quad (15)$$

SnSe₂ birləşməsinin kristallaşma səthinin (x=0.61÷0.95; y=0.52÷1) analitik ifadəsi:

$$T,K= (-979787,7+7,75995E6*x^1-2,55035E7*x^2+4,45533E7*x^3-4,36243E7*x^4+2,26954E7*x^5-4,90063E6*x^6)*y^{0.35} \quad (16)$$

Ag₈SnSe₆ birləşməsinin kristallaşma səthinin (x=0.35÷0.55; y=0.135÷0.62) analitik ifadəsi:

$$T,K= 802+2044*y-6091*y^2+4237*y^3-4049+26685*x-57428*x^2+ 40000*x^3 \quad (17)$$

Sn-Se tərəfdən (x=0.16÷0.49; y=0.33÷1) təbəqələşmə səthinin analitik ifadəsi:

$$T,K= (-1729+37308*x-173477*x^2+357612*x^3-275627*x^4)*y^{0.38} \quad (18)$$

Ag –Se tərəfdən (x=0.12÷0.31; y=0÷0.33) təbəqələşmə səthinin analitik ifadəsi:

$$T,K= (-4057+104175*x-753245*x^2+2.40816*10^6*x^3-2.87183*10^6*x^4)*(1-y) \quad (19)$$

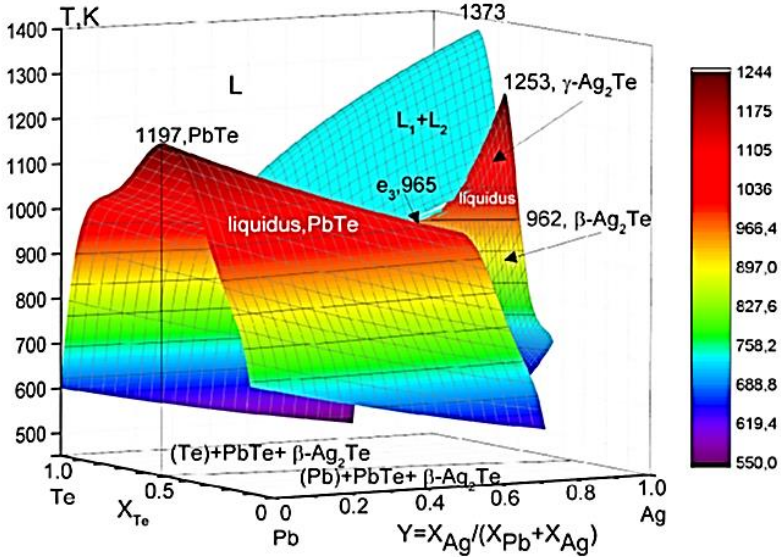
Ag –Se tərəfdən (x=0.44÷0.98; y=0÷0.53) təbəqələşmə səthinin analitik ifadəsi:

$$T,K= (-9582+60199*x-127181*x^2+119250*x^3-41950*x^4)*(1-y)^{0.4} \quad (20)$$

(14-20) tənliklərində: $x=x_{Se}$; $y=x_{Sn}/(x_{Sn}+x_{Ag})$; x_{Ag} , x_{Sn} , x_{Se} –Ag-Sn-Se maye məhlullarında komponentlərin mol payı; $f(x)$ polinomları Ag-

Se və Sn-Se sərhəd sistemlərində birləşmələrin likvidus ayrıləri və maye fazada təbəqələşmə hüdudlarının koordinatları əsasında müəyyən edilir; y-in dəyişməsi ilə əlaqəli parametrlər Ag-Sn-Se üçlü sistemin məhdud sayda DTA məlumatlarına əsasən və $Ag_2Se - SnSe$ və $Ag_2Se - SnSe_2$ kvazibinar kəsiklərinin koordinatlarına əsasən təyin edilir.

Bəşinci fəsil Ag-Pb-Te və Ag - Pb - Te sistemlərinin T-x-y diaqramlarının termodinamiki təhlili və 3D modelləşdirilməsinə həsr olunmuşdur. Bu sistemlərdə üçlü birləşmələr əmələ gəlmir və sistemlər müvafiq olaraq aşağıdakı kvaziüçlü sistemlərə bölünür: Ag - Ag_2Se - PbSe, $Ag_2Se - Se - PbSe$, Ag - PbSe - Pb, və Ag - Ag_2Te - PbTe, $Ag_2Te - Te - PbTe$, Ag - PbTe - Pb. Bu sistemlərdə Ag_2Se (Te), PbSe (Te) kristallaşma səthlərinin və təbəqələşmə sahələrinin bir qrafikdə 3D görüntülənməsi məsələsi həll edilmişdir. Ag-Pb-Te sistemi üçün 3D modelin görüntülənməsi şəkil 4-də verilmişdir.



Şəkil 4. Ag-Pb-Te sistemində Ag_2Te , PbTe birləşmələrinin kristallaşma səthlərinin və maye fazaların təbəqələşmə səthinin 3D-görüntüsü.

PbSe və PbTe birləşmələrinin likvidus temperaturlarının qatılıqdan asimetrik asılılığı səbəbindən OriginLab proqramının analitik opsiyasında 7 üzvlü polinomlardan istifadə edilmişdir. Ag-Pb-Te sistemində likvidus səth üçün bu tənlik alınmışdır:

$$T, K(\text{PbTe, Ag-Pb-Te}) = (600 + 6748 * x - 38140 * x^2 + 84742 * x^3 + 11426 * x^4 - 308980 * x^5 + 408942 * x^6 - 165767 * x^7) * (0,769 + 0,1556 * y + 0,0754 * y^2); \quad (x = x_{\text{Te}} = 0 \div 0.89; y = 0.2154 \div 1.0) \quad (21)$$

Altıncı fəsil Ag-Pb-Se və Ag-Pb-Te sistemlərində P(təzyiq) - T(temperatur) - X(tərkib) faza diaqramlarının müəyyənləşdirilməsinə və modelləşdirilməsinə həsr edilmişdir. Üçlü sistemlərin P-T-X diaqramları bərk fazanın maye ərintinin kristallaşması və buxar fazadan çökdürülməsi yolu ilə alınmasının şəraitini müəyyən etmək üçün lazımdır. Lakin, bu dissertasiya işinə qədər yarımkeçiricilərin texnologiyası üçün böyük maraq kəsb edən Ag-A^{IV}(Ge, Sn, Pb)-Se, Ag-Pb-Te üçlü sistemlərin P-T-X diaqramları haqqında məlumatlar yox idi. Belə məlumat yalnız sadalanan üçlü sistemlərin sərhəd sistemlərində əmələ gələn selenid və telluridlər üçün mövcud idi. Bu vəziyyət, tərkibində selen və tellur kimi uçucu komponentlər olan üçlü sistemlərin P-T-X faza diaqramlarının təcübi təyin edilməsinin mürəkkəbliyi ilə əlaqələndirilir.

Təcrübi və nəzəri üsullarla iki atomlu selen və tellur molekullarının Ag-Pb-Se və Ag-Pb-Te sistemlərində PbSe və PbTe birləşmələrinin likvidus səthi üzrə doymuş buxar təzyiqləri təyin edilmiş və 3D modelləşdirilmişdir. Termodinamikanın klassik riyazi aparatı əsasında selen və tellurun doymuş buxar təzyiqini hesablamaq üçün aşağıdakı tənliklər alınmışdır:

$$\Delta G_{PbX}^{exl,l} = \Delta H_{298}^0(PbX) - T \Delta S_{298}^0(PbX) - \Delta c_{p,298} T \left[\ln \left(\frac{T}{298} \right) + \frac{298}{T} \right] - RT \ln x_{Pb}^l x_X^l \quad (22a)$$

Bundan sonra, 22a tənliyi ilə hesablanmış $\Delta G_T^{exs,l}$ qiymətlər əsasında, xalkogenin parsial izafi sərbəst enerjisinin qiymətləri,

selen və ya tellurun doymuş buxarının parsial təzyiqləri hesablanmışdır:

$$\Delta \bar{G}_i^{exs,l} = [\Delta G_{PbX}^{exl,l} + (1 - x_i) \frac{\partial \Delta G^{exl,l}}{\partial x_i}] (1 - x_i) \quad (22b)$$

$$\ln P(X_2) = \frac{2\Delta \bar{G}_X^{exs,l}}{RT} + \ln(x_X)^2 P_{X_2}^0; \text{ burada } X=\text{Se}; \text{ Te}. \quad (23)$$

(23) tənliyində:

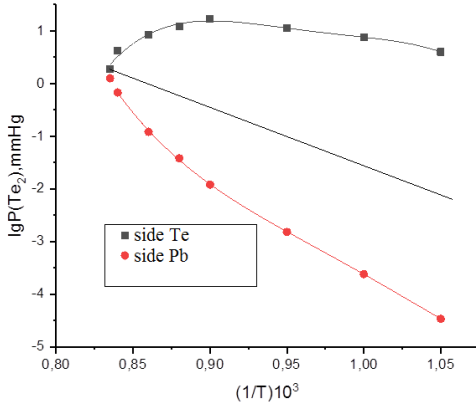
$$\frac{2\Delta \bar{G}_X^{exs,l}}{RT} + \ln(x_X)^2 P_{X_2}^0 = \ln[(x_X \gamma_X)^2 P_{X_2}^0] \quad (23a)$$

Burada γ_X - selen və ya tellurun doymuş maye məhlulundakı aktivlik əmsalı olub, termodinamik aktivliyin və xalkogenin əridilmiş və saf xalkogen üzərində doymuş buxar təzyiqləri ilə aşağıdakı formullarla əlaqəlidir:

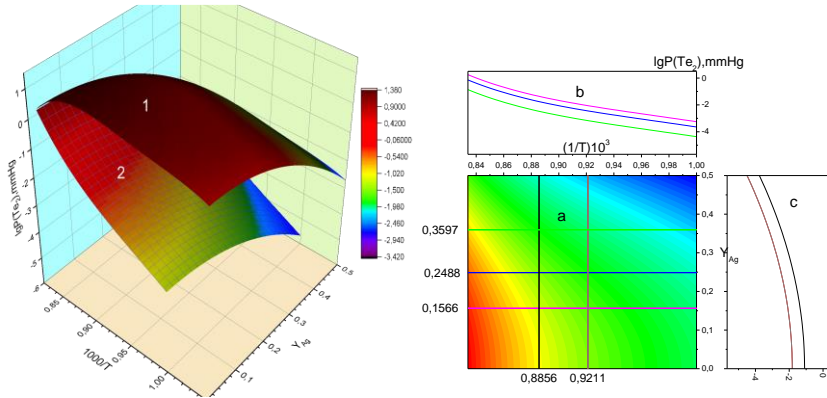
$$a_X = \gamma_X x_X; \quad a_X = (P_{X_2}/P_{X_2}^0)^{1/2} \quad (23b)$$

Dissertasiyada işlənmiş doymuş buxar təzyiqinin hesablanma üsulunun etibarlılığını yoxlamaq üçün, bu hesablama üsulu ədəbiyyatda etibarlı təcrübi məlumatları olan Pb-Te sistemində sınaqdan keçirilmişdir (Şəkil 5). Qurğuşun-tellur ərintilərinin üstündəki buxar fazası, iki atomlu tellur molekullarından başqa, bir və dörd atomlu tellur molekullarını da ehtiva edir. Lakin öyrənilən 900-1200K temperatur aralığında buxar fazası əsasən ikiatomlu tellur molekullarından ibarətdir (88-90%). Sıfır-membran sıfır təzyiq göstəricisinin ölçmələri ilə əldə edilən təcrübi məlumatlar ümumi təzyiqə aiddir. İki atomlu tellur molekulunun ümumi təzyiqdəki parsial təzyiqi, tellur molekullarının buxar fazasında paylanmasının qanunauyğunluğuna əsaslanaraq hesablanmışdır. PbTe uçucu maddələrə aiddir. Bununla birlikdə qurğuşun tellurid PbTe-in doymuş buxar təzyiqi, buxar fazasının digər komponentlərinin buxar təzyiqindən bir neçə tərtib aşağıdır.

Ag-Pb-Te sistemində qurğuşun (II) telluridin likvidus səthi üzrə Te_2 doymuş buxarının parsial təzyiqinin izoxətləri üçün P-T-x diaqramının 3D modeli şəkil 6-da görüntülənmişdir.



Şəkil 5. İki atomlu tellur molekullarının doymuş buxar təzyiqinin temperaturdan asılılığı. Simvollar təcrübə məlumatları göstərir [Hsieh K.C., Sharma R.C. // Alloy Phase Diagrams Bülleteni. - Avqust 1989. V. 10. p. 340]. Əyrilər (22,23) tənliyinə görə hesablanmış kəmiyyətləri approksimasiya edir.



Şəkil 6. Ag-Pb-Te sistemində PbTe-in likvidus səthi üzrə Te_2 doymuş buxar parsial təzyiqinin P-T-x diaqramının 3D görüntüsü və 2D proyeksiyası. 1-PbTe-Te bölgəsi (p-tipli keçiricilik, tənlik 24a), 2- PbTe-Pb bölgəsi (n- tipli keçiricilik, tənlik 24b).

$$\lg P(\text{Te}_2, \text{PbTe} + \text{Te}), \text{mmHg} = \text{Intercept} + B1 \cdot x^1 + B2 \cdot x^2 + B3 \cdot x^3 + B4 \cdot x^4 = -3553 + 14706 \cdot 1000/T - 22795 \cdot (1000/T)^2 + 15692 \cdot (1000/T)^3 - 4049 \cdot (1000/T)^4 - 13.56 \cdot y^2 ; x = x_{\text{Ag}} = 0 - 0.5; y = 1000/T = 0.81 - 1.05 \quad (24a)$$

$$\lg P(\text{Te}_2, \text{PbTe} + \text{Pb}), \text{mmHg} = \text{Intercept} + B1 \cdot x^1 + B2 \cdot x^2 + B3 \cdot x^3 + B4 \cdot x^4 = 1575 - 6268 \cdot 1000/T + 9372 \cdot (1000/T)^2 - 6237 \cdot (1000/T)^3 + 1555 \cdot (1000/T)^4 - 10.7 \cdot y^2 \quad (24b)$$

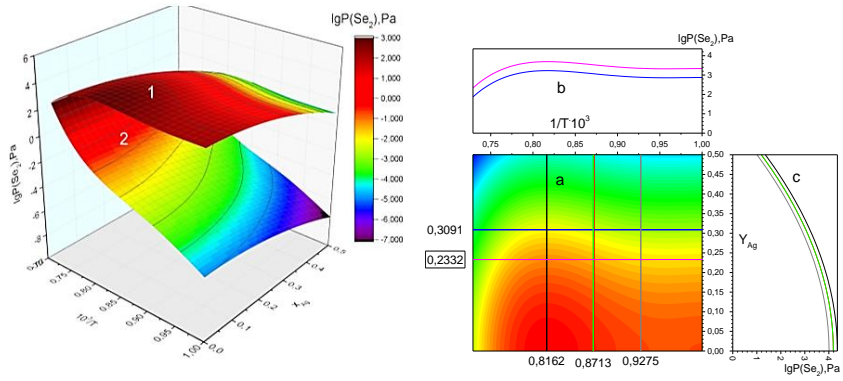
Ag-Pb-Se sistemi. Hesablama ilə təyin olunmuş ikiatomlu selen molekullarının doymuş buxar təzyiqinin qiymətləri təcrübə xətası daxilində təcrübənin nəticələri ilə uzlaşır (Cədvəl 1). Hesablanmış məlumatların etibarlılığını yoxlamaq üçün selenin doymuş buxar təzyiqi $\text{Ag}_2\text{Se}-\text{PbSe}$ kəsiyi boyunca bəzi nümunələr üçün kvars sıfır manometri ilə ölçülmüşdür. Hesablanma ilə təyin edilən qiymətlər eksperimental ölçmələrə uyğundur.

Cədvəl 1. $P(\text{Se}_2, \text{mmHg})$ doymuş buxar təzyiqinin PbSe likvidusu üzrə qiymətləri

| $(1/T)10^{-3}$ \ / P_{Se_2} (mmHg) | 0.73 | 0.75 | 0.77 | 0.80 | 0.85 | 0.90 |
|---|------|------|-------|-------|---------------------|---------------------|
| eksper.(diss) | 8±1 | 26±2 | 52±2 | 115±3 | 118±2 | 67±2 |
| eksper.* | 5.9 | 20.2 | 47.3 | 108.4 | 105.9 | 55.6 |
| hesablanma (25, $x_{\text{Ag}}=0$) | 7.7 | 0.20 | 0.021 | 0.01 | $1.8 \cdot 10^{-4}$ | $1.2 \cdot 10^{-5}$ |
| eksper.* | 5.9 | 0.21 | 0.023 | 0.001 | $1.5 \cdot 10^{-4}$ | $1.6 \cdot 10^{-5}$ |

*Lin, J.-C. // J. of Phase Equilibria. 1996. Vol. 17, N. 3. p 253

$\text{Ag}-\text{Pb}-\text{Se}$ sistemində qurğuşun (II) selenidin likvidus səthi üzrə Se_2 doymuş buxarının parsial təzyiqinin izoxətləri üçün $P-T-x$ diaqramının 3D modeli və 2D proyeksiyası şəkil 7 və 8-də görüntülənmişdir.



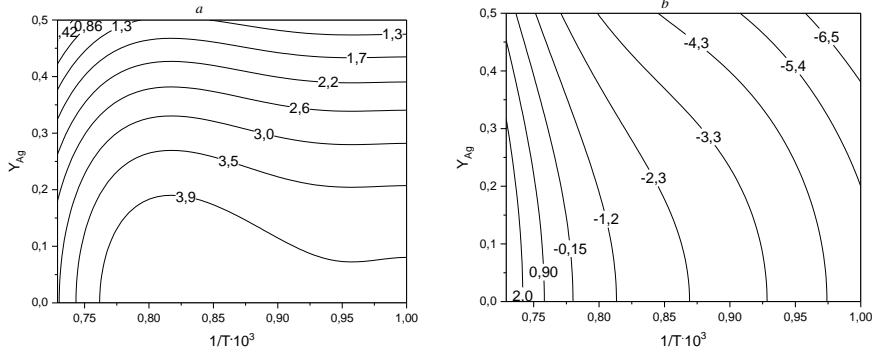
Şəkil.7. Ag-Pb-Se sistemində PbSe-in likvidus səthi üzrə Se_2 molekullarının doymuş buxar parzial təzyiqinin P-T-x diaqramının 3D görüntüsü. 1-PbSe-Se bölgəsi (tənlik 25a), 2-PbSe-Pb bölgəsi (tənlik 25b).

PbSe-Se bölgəsi:

$$\lg p_{\text{Se}_2} (\text{Pa}) = [-1281 + 5624(1000/T) - 9190(1000/T)^2 + 6648(1000/T)^3 - 1797(1000/T)^4] - 12 x_{\text{Ag}}^2 \quad (25a)$$

PbSe- Pb bölgəsi:

$$\lg p_{\text{Se}_2} (\text{Pa}) = [2026 - 8778(1000/T) + 14247(1000/T)^2 - 10259(1000/T)^3 + 2759(1000/T)^4] - 10 x_{\text{Ag}}^2 \quad (25b)$$



Şəkil.8. Ag-Pb-Se sistemində PbSe-in likvidus səthi üzrə Se_2 molekullarının doymuş buxar parsial təzyiqinin P-T-x diaqramının 2D proyeksiyaları. a-PbSe-Se bölgəsi, b-PbSe-Pb bölgəsi.

ƏSAS NƏTİCƏLƏR

1. Ümumi xalkogenid anionu olan üçlü sistemlərin termodinamik funksiyaları və faza diaqramlarının 3D modelləşdirilməsi üçün analitik üsul işlənmiş və Ag- A^{IV} (Ge, Sn, Pb) -Se, Ag-Pb-Te sistemlərində tətbiq olunmuşdur. Tarazlıqda olan fazaların tərkibini, temperaturunu və termodinamik parametrlərini əlaqələndirən tənliklər alınmışdır
2. Təhlil və hesablamalarla gümüş, germanium, qalay və qurğuşunun iki və üç komponentli selenidləri və telluridləri üçün ən etibarlı məlumatlar sistemləşdirilmiş və Ag-Ge-Se və Ag-Sn-Se sistemlərinin termodinamiki trianqulyasiyası üçün istifadə olunmuşdur. Ag-Ge-Se və Ag-Sn-Se sistemlərinin Ag-Se, Sn-Se və Ge-Se yan sistemlərində qatılıq üçbucağının içərisinə tərəf yayılan geniş təbəqələşmə sahələri mövcuddur. Təbəqələşmə sahələrinin sərhədlərini təyin etmək üçün requlyar məhlulların asimmetrik modelindən və fazaların daxili dayanıqlılığının termodinamiki şərtindən $(\partial^2 \Delta G^0 / \partial x^2)_{P,T} > 0$ istifadə edilmişdir:

$$\Delta G_T^0 = [a + b(1 - x)^2](1 - x)x + RT[x \ln x(1 - x) \ln(1 - x)]$$

$$(\partial^2 \Delta G^0 / \partial x^2)_{P,T} = -2*(a + b*x^2 + 2*b*x*(x-1) + b*x*(3*x - 1)) + 8.31*T/(1-x) + 8.31*T/x$$

3. Ag-Pb-Se и Ag-Pb-Te sistemlərində üçlü birləşmə əmələ gəlmir. Bu sistemlər üç stabil kvaziüçlü sistemlərə bölünür: Ag–Ag₂Se–PbSe, Ag₂Se–Se–PbSe, Ag–PbSe–Pb; Ag–Ag₂Te–PbTe, Ag₂Te–Te–PbTe, Ag–PbTe–Pb. Təcrübi nəticələrə və termodinamiki hesablamalara əsasən, mono və invariant tarazlığın koordinatları müəyyənləşdirilmiş, Ag-Pb-Se и Ag-Pb-Te sistemlərində gümüşün, qurğuşunun selenid və telluridlərinin kristallaşma səthlərinin və təbəqələşmənin 3D modelləri işlənmişdir. Bu sistemlərdə Ag₂Se, Ag₂Te, PbSe və PbTe-in kristallaşma səthlərinin və təbəqələşmə sahələrinin bir qrafikdə 3D görüntülənməsi məsələsi həll edilmişdir
4. Məhlullar termodinamikasının klassik riyazi aparatına əsasən ikiatomlu selen molekullarının Se₂ və ikiatomlu tellur molekullarının Te₂ doymuş buxar təzyiqinin likvidus koordinatlarının (T, x), parsial izavi Gibbs enerjisinin ($\Delta \bar{G}_{Xe}^{exs,l}$), aktivlik əmsalının (γ_{Xe}), təmiz selenin və tellurun doymuş buxar təzyiqinin ($P_{Xe_2}^0$) qiymətlərinə əsasən birqiymətli hesablamaq üçün tənliklər alınmışdır. Məsələn, P(Te₂)-nin qiymətlərinin n-tip və p-tip qurğuşun tellurudin likvidus səthi üzrə 3D modeləşməsi üçün bu funksiyalar alınmışdır:

$$\lg P(\text{Te}_2, \text{PbTe} + \text{Te}), \text{mmHg} = \text{Intercept} + B1*x^1 + B2*x^2 + B3*x^3 + B4*x^4 = -3553 + 14706*1000/T - 22795*(1000/T)^2 + 15692*(1000/T)^3 - 4049*(1000/T)^4 - 13.56*y^2; x = x_{Ag} = 0 - 0.5; y = 1000/T = 0.81 - 1.05;$$

$$\lg P(\text{Te}_2, \text{PbTe} + \text{Pb}), \text{mmHg} = \text{Intercept} + B1*x^1 + B2*x^2 + B3*x^3 + B4*x^4 = 15756268*1000/T + 9372*(1000/T)^2 - 6237*(1000/T)^3 + 1555*(1000/T)^4 - 10.7*y^2$$

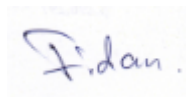
5. Ag-Ge-Se, Ag-Sn-Se, Ag-Pb-Se и Ag-Pb-Te sistemlərinin T-x-y diaqramlarının Ag-Pb-Se və Ag-Pb-Te sistemlərinin P-T-x diaqramlarının 3D modelləri və 2D proyeksiyaları texnoloji məqsədlər üçün istifadə oluna bilər. 2D və 3D analitik ifadələrin hər biri uyğun olaraq $100 \times 100 = 10\,000$ və $50 \times 50 = 2500$ matrisə cədvəllərini özündə saxlayır. Bu informasiya Ag-Ge-Se, Ag-Sn-Se, Ag-Pb-Se(Te) sistemlərində maye və buxar fazadan n-tip və ya p-tip bərk yarımkeçirici fazanın alınmasının temperatur, təzyiq və tərkib parametrlərini təyin etmək üçün istifadə oluna bilər
6. Hal diaqramının üçölçümlü koordinatda analitik funksiyaları tarazlıqda olan fazaların 3D görüntüsünü müxtəlif bucaqlardan müşahidə etməyə, 2D proyeksiyaları və klassik qrafiklər almağa, faza diaqramının koordinatlarını cədvəlləşdirməyə imkan verir

Dissertasiya mövzusu üzrə çap edilmiş işlər

1. Ибрагимова Ф. С., Тагиев Э. Р., Бабанлы Н. Б., Мамедов А. Н. 3D-моделирование поверхностей кристаллизации Ag₂Se и PbSe в тройной системе Ag-Pb-Se. // Конденсированные среды и межфазные границы. 2016. 18(2), 219-224. Retrieved from <https://journals.vsu.ru/kcmf/article/view/127>
2. Тагиев Э., Ибрагимова Ф., Бабанлы Н., Мамедов А. Физико-химический анализ и 3d-моделирование системы Ag-Pb-Te. // Kondensirovannye Sredy I Mezhfaznye Granitsy = Condensed Matter and Interphases, 2016, 18(4), 550-557. Retrieved from <https://journals.vsu.ru/kcmf/article/view/165>
3. Мамедов А.Н., Ибрагимова Ф.С.. Термодинамическая триангуляция системы Ag-Ge-Se //Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. 2016, № 7, С. 553-557
4. Бабанлы Н. Б., Мамедов А. Н., Тагиев Э. Р., Ибрагимова Ф. С. 3D-моделирование поверхности кристаллизации PbSe в тройной системе Ag-Pb-Se// АМЕА М. Nağıyev adına Kataliz

- və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun 80 illiyinə həsr olunmuş konfransın materialları. Bakı, 2016, s.159-160
5. Алвердиев И. Дж., Завражнов А. Ю. , Мамедов А. Н., Ибрагимова Ф. С. 3D Моделирование поверхности ликвидуса системы Ag-Ge-Se //Müasir kimya və biologiyanın aktual problemləri. Beynəlxalq elmi konfrans 12-13 may 2016-cı il. Gəncə 2016. Konfrans Ümummilli lider Heydər Əliyevin anadan olmasının 93-cü ildönümünə həsr olunub.2016, I Hissə, səh.37-38
 6. Yusibov Yu. A., Alverdiev I. Dzh., Ibrahimova F.S., Mamedov A.N., Tagiev D.B., Babanly M. B. Study and 3D Modeling of the Phase Diagram of the Ag–Ge–Se System //Russian Journal of Inorganic Chemistry.2017. Vol. 62, No. 9, pp. 1223–1233
 7. Ибрагимова Ф.С., Бабанлы Н.Б., Мамедов А.Н., Юсубов Ю.А. Поверхность кристаллизации Ag_2Se , $SnSe_2$, Ag_8SnSe_6 в тройной системе Ag-Sn-Se. //Gəncə Dövlət Universiteti. Elmi Xəbərlər. 2017, N.1, 3-7.
 8. Babanly N.B., Yusibov Yu.A., Mamedov A.N., Ibrahimova F.S. Thermodynamic calculation and 3D modeling of the P-T-x diagram Ag-Pb-X(S,Se,Te) systems //XXI International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia (RCCT–2017). 26-30 June 2017.Akademgorodoc. Novosibirsk.p.285
 9. Ibragimova Fidan, Ahmedova Nuray, Babanly Nizameddin, Mammadov Asif. Thermodynamic calculation and 3D modeling of the P-T-X diagram Cu-Pb-Se and Ag-Pb-Se systems//THERMAM 2018. 7th Rostocker International Conference:“Thermophysical Technical Thermodynamics” 26 - 27 July 2018, Rostock, Germany.p.82
 10. Ibragimova F.S., Babanly N.B., Mammadov A.N. 3D modeling of the Crystallization surface in the ternary system Ag-Sn-Se with Bayesian uncertainty analysis// Heydər Əliyevin anadan olmasının 95-ci ildönümünə həsr olunmuş tələbə və gənc tədqiqatçıların “Gənclər və elmi innovasiyalar” mövzusunda Respublika Elmi-texniki konfrans. AzTU, 3-5 may 2018. p.296,297

11. İbrahimova A, Məmmədov A. Ag-Se sistemində maye fazada təbəqələşmənin hüdudlarının termodinamiki hesablanması və modelləşdirilməsi //Heydər Əliyevin anadan olmasının 95-ci ildönümünə həsr olunmuş tələbə və gənc tədqiqatçıların “Gənclər və elmi innovasiyalar” mövzusunda Respublika Elmi-texniki konfrans. 3-5 may 2018. S.304,305
12. İbrahimova Fidan, Məmmədov Asif. Ag-Se sisteminin maye ərintilərinin termodinamiki stabilliyi. Akademik Murtuza Nağıyevin 110 illik yubileyinə həsr olunmuş elmi konfransın tezisləri. Bakı, 2018., s.231
13. İbragimova F.S.. Calculation of standard thermodynamic functions of argyrodite Ag_8GeSe_6 //Chemical Problems. 2019,N.3. pp.358-365/ DOI: 10.32737/2221-8688-2019-3-358-365
14. İbragimova F.S. Ag-Sn-Se system: Phase diagram, thermodynamics and modeling //Azerbaijan Chemical Journal № 4, 2019, p.84-93/doi.org/10.32737/0005-2531-2019-4-84-93
15. Mammadov Asif, Mammadov Elman, İbrahimova Fidan, Ahmedova Nuray, Tagiyev Dilgam. Thermodynamic Analysis and 3D Modeling of Systems Ag-Pb-Se and Cu-Pb-Se on Liquidus PbSe using the Positions of Fuzzy Systems //THERMAM 2019. 6th Thermophysical and mechanical properties et advanced materials; 22-24 september, 2019.Çeşme-Izmir/Turkey. Abstracts & Full Text Proceedings. p.79-83
16. Mammadov Asif, Mammadov Elman, İbrahimova Fidan, Ahmedova Nuray, Tagiyev Dilgam. 3D Modeling of the crystallization surface PbSe in the ternary systems Ag-Pb-Se and Cu-Pb-Se with Bayesian uncertainty analysis//THERMAM 2019. 6th Thermophysical and mechanical properties et advanced materials; 22-24 september, 2019. Çeşme-Izmir /Turkey. Abstracts Proceedings.p.53



Dissertasiyanın müdafiəsi 30 dekabr 2021-ci il tarixində

saat 10⁰⁰-da AMEA-nın akademik Murtuza Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.15 Dissertasiya şurasının iclasında keçiriləcək.

Ünvan: AZ 1143 Bakı şəhəri, H.Cavid pr.113

Dissertasiya ilə Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun kitabxanasında tanış olmaq mümkündür.

Dissertasiya və avtoreferatın elektron versiyaları Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun rəsmi internet saytında yerləşdirilmişdir.

Avtoreferat 23 noyabr 2021-ci il tarixində zəruri ünvanlara göndərilmişdir.

Çapa imzalanıb: 19.11.2021

Kağızın formatı: A5

Həcm: 36716

Tiraj: 30