ISNN:2181-1296



SHAROF RASHIDOV NOMIDAGI SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI

САМАРКАНДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ ШАРОФА РАШИДОВА

SAMARKAND STATE UNIVERSITY NAMED AFTER SHAROF RASHIDOV

ILMIY AXBOROTNOMA

НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК
SCIENTIFIC JOURNAL

ANIQ VA TABIIY FANLAR SERIYASI

Matematika, Mexanika, Informatika
Fizika, Kimyo, Biologiya, Geografiya

№ 5/1 (141)
2023

ISSN 2181-1296

ILMIY AXBOROTNOMA

НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК **SCIENTIFIC JOURNAL**

2023-yil, 5-son (141) **ANIQ VA TABIY FANLAR SERIYASI**

Matematika, Mexanika, Informatika, Fizika, Kimyo, Biologiya, Geografiya

Samarqand viloyat matbuot boshqarmasida ro‘yxatdan o‘tish tartibi 09-25.
Jurnal 1999-yildan chop qilina boshlagan va OAK ro‘yxatiga kiritilgan.

BOSH MUHARRIR **R. I. XALMURADOV, t.f.d., professor**
BOSH MUHARRIR O‘RINBOSARLARI: **H.A. XUSHVAQTOV, f-m.f.d., dotsent**
A. M. NASIMOV, t.f.d., professor

TAHRIRIYAT KENGASHI:

ANIQ FANLAR

SH.A.ALIMOV - O‘zFA akademigi
S.N.LAKAYEV - O‘zFA akademigi (SamDU)
M.M.MIRSAIDOV - O‘zFA akademigi
A.S.SOLEEV - f.-m.f.d., professor (SamDU)
I.A.IKROMOV - f.-m.f.d., professor (SamDU)
B.X.XO‘JAYAROV - f.-m.f.d., professor (SamDU)
A.G.YAGOLA - f.-m.f .d., professor (Moskva davlat universiteti, Rossiya)
I.I.JUMANOV - f.-m.f .d., professor (SamDU)
X.X.XUDOYNAZAROV - t.f.d., professor (SamDU)
ALBERTO DEL BIMBO - Florensiya universiteti professori, Italiya
L.SABIROV - f.-m.f .d., professor (SamDU)
A.JUMABOYEV - f.-m.f .d., professor (SamDU)
N.N.NIZAMOV - f.-m.f.d., professor (SamDU)
O.Q.QUVONDIQOV - f.-m.f.d., professor (SamDU)
I.A.RAXMATULLAYEV - f.-m.f .d., professor
A.SH.YARMUXAMEDOV - f.-m.f.n., (SamDU)
X.S.XAYDAROV - f.-m.f.n., dotsent (SamDU)

TABIY FANLAR

M.X.ASHUROV - O‘zFA akademigi
N.B. FERAPONTOV - k.f .d., professor (Moskva davlat universiteti, Rossiya)
SH. M. TUGIZOV - professor, Koliforniya universiteti, AQSh
H. I. AKBAROV - k.f.d., professor (O'zMU)
E. A. ABDURAXMONOV - k.f.d., professor (SamDU)
N. K. MUXAMADIYEV - k.f.d., professor (SamDU)
L. A. BULAVIN - Kiev milliy universiteti professori, Ukraina
X. Q. XAYDAROV - b.f.d., professor (SamDU)
Z. I. IZZATULLAYEV - b.f.d., professor (SamDU)
Sh. T. XOLIQULOV - g.f.d., professor (SamDU)
S. B. ABBASOV - g.f.d., professor (SamDU)
Q. S. YARASHEV - g.f.d., professor (SamDU)
GUN-SIK PARK - Seul univeriteti professori, Koreya
D.B.XURSANOV - g.f.f.d., dotsent (SamDU)
M. S. QUZIYEV - b.f.f.d., dotsent (SamDU)

Obuna indeksi – yakka tartibdagi obunachilar uchun **- 5583,**
tashkilot, korxonalar uchun **- 5584**

MUNDARIJA

Икромов И.А, Баракаев А.М. *Об ограниченности максимальных операторов для выпуклых функций, не имеющих конечный линейный тип*…….....	3-10
Safarov A.N., Muzafarov A.M., To‘xtayev U.O‘., Tog‘ayev B.S., Salimov Sh.G‘., Esanov I.T. *Tabiiy suvlar tarkibidagi radionuklidlar miqdorini radiokimyoviy radiometriya usullari yordamida aniqlash metodikasi*……..	11-20
Ruziyev J.E., Abduraxmanov I.E., Suvonqulov Sh.B. *Analitik obyektlardagi bariy ionlarini ionometrik aniqlash*……..	21-25
O‘rozov S., Aslanov Q., Qo‘ldoshev O. *Oltingugurt qoplamali fosforli o‘g‘itlar olish*……..	26-30
Mamatov Sh., Omonov Sh. *Differensial tenglamalar misolida fanlararo bog‘lanish*……..	31-35
Ахмеджанов Ф.Р., Тугалов Ф.Б., Курбанов Ж.О. *$NaCl_xBr_{1-x}$ кристалларининг акустик хоссалари*……	36-40
Inxonova A., Eshtursunov D., Botirov S., Murtazaqulov M., Bekchanov D. *Oqava suvlarni biologik tozalashda pvc&pei asosida olingan mis polimer komlpleksining qo’llanilishi*……	41-48
Qurbonov P.R. *O‘zbekiston respublikasi urbanistik tarkibi rivojlanishining geografik jihatlari*.....	49-55
Ikromov I.A., Jo‘raqulov A.J. *Regulyarlashtirilgan o‘lchovning bahosi haqida*……	56-63
Байжуманов А.А., Бердимуродов М.А. *Метод решения систем нелинейных булевых уравнений на основе минимизации дизъюнкций сложных конъюнкций*……	64-70
Abdullayev J.U. *Uglevodorodlar asosida spirtlar sintezi*……	71-75
Boyqobilov D.B., Jumag‘ulov Sh.H., Ro‘zimuradov O.N. *Tartiblangan titan dioksid nanotrubkalarining shakllanishi*……	76-80
Ахмеджанов Ф.Р., Мустафаев Т.Ш., Эшниязов О.И., Нуждов Г.С., Авдиевич В.Н. *Лантан трифторид кристалларида ионларнинг харакатига эластик деформациянинг таъсири*……	81-85
Хайдаров И.К. *Моделирование переноса растворенного вещества в неоднородном пороупругом глинистом сланце*……	86-91
Urolov Sh.Z., Shaymardanov Z.Sh., Jalolov R.R., Rustamova B.N., Arziqulov E.U. *Rux oksidi nanostrukturalarining morfologik va kristallografik xossalarining sintez sharoitiga bog‘liqligi*……	92-99
Zufarov A.M., Sagdeyev D.O., Galyametdinov Yu.G., Muxamadiyev N.K. *Turli xil anion stabilizatorlar bilan stabillashgan* CdS *sintezi va uning fotokatalitik xossalari*……	100-108

UDK: 53.001.57: 544.623. **DOI: https://doi.org/10.59251/2181-1296.2023.v5.141.1.2343**

ВОЗДЕЙСТВИЕ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ПЕРЕМЕЩЕНИЕ ИОНОВ В КРИСТАЛЛАХ ТРИФТОРИДА ЛАНТАНА

Ф.Р. Ахмеджанов[1,2], Т.Ш. Мустафаев[1], О.И. Эшниязов[1], Г.С. Нуждов[2], В.Н. Авдиевич[2]

[1]Самаркандский государственный университет имени Шарофа Рашидова
[2]Институт Ионно-плазменных и лазерных технологий
E-mail: mustafayevtemur1@gmail.com

Annotasiya. Superionli lantan triftorid kristallarining kristall panjarasida ionlarni tashish parametrlariga akustik to'lqin tomonidan yaratilgan elastik deformasiyaning ta'siri o'rganildi. Dielektrik fazada elastik deformasiya ta'sirida zaryad tashuvchilarning konsentrasiyasi va ularning harakatchanligi siqilish yoki taranglik joylarida juda katta farq qilishi mumkinligi ko'rsatilgan. Ushbu zonalarda akustik to'lqinning yarmi uzunligiga teng bo'lgan davr bilan almashinadigan ion o'tkazuvchanligi uchta kattalik darajasida farq qilishi mumkin.

Kalit so'zlar: Lantan triftorid kristallar, dielektrik faza, elastik deformasiya, ionlar xarakati.

Воздействие упругой деформации на перемещение ионов в кристаллах трифторида лантана

Аннотация. Исследовано влияние упругой деформации, создаваемое акустической волной, на параметры переноса ионов в кристаллической решетке суперионных кристаллов трифторида лантана. Показано, что в диэлектрической фазе под действием упругой деформации концентрация носителей заряда и их подвижность могут сильно отличаться в областях сжатия или растяжения. В этих зонах, чередующихся с периодом, равным полудлине акустической волны, ионная проводимость может различаться на три порядка.

Ключевые слова: кристалл трифторида лантана, диэлектрическая фаза, упругая деформация, перемещение ионов.

Effect of elastic deformation on the moving of ions in lanthanum trifluoride crystals

Abstract. The effect of elastic deformation created by an acoustic wave on the parameters of ion transport in the crystal lattice of superionic lanthanum trifluoride crystals has been studied. It has been shown that in the dielectric phase, under the action of elastic deformation, the concentration of charge carriers and their mobility can differ greatly in areas of compression or tension. In these zones, alternating with a period equal to the half-length of the acoustic wave, ionic conductivity can differ by three orders of magnitude.

Keywords: lanthanum trifluoride crystal, dielectric phase, elastic deformation, ion moving.

Суперионные кристаллы представляют собой класс твердых материалов, в которых фазовое превращение из диэлектрического состояния в высокопроводящее (суперионное) состояние связано с температурным разупорядочением одной из кристаллических подрешеток. В первом приближении в суперионной фазе эти кристаллы представляют собой "жидкость" из подвижных анионов, текущую в подрешетке неподвижных катионов. Одной из их важнейших особенностей является высокая проводимость по определенному типу ионов. Так, ионная проводимость хороших суперионных материалов находится в пределах от 10^{-1} до 10^{0} $Ом^{-1}·м^{-1}$ [1-4].

Суперионные проводники широко применяются в целом ряде электротехнических устройств [4-7]. Их физические свойства достаточно подробно изучены при помощи различных методов [1-5], в том числе при воздействии электрических и тепловых полей. Вместе с тем влияние акустических полей на перенос ионов практически не исследовано [7].

В настоящей работе путем моделирования исследовано воздействие упругой деформации на перемещение ионов в суперионных кристаллах трифторида лантана в диэлектрической фазе.

Описание исследованных моделей кристаллической решетки. Исследованные кристаллы трифторида лантана LaF_3, представляют собой типичный суперионный проводник с проводимостью порядка 10^{-5}–10^{-3} $Ом^{-1}·м^{-1}$ [1–3]. Симметрия этих кристаллов соответствует тригональной группе симметрии с пространственной группой $P3c1$ [1, 2]. В кристаллической решетке LaF_3 имеются три типа структурно неэквивалентных ионов фтора, обозначаемых соответственно: F_1, F_2 и F_3 и соотносящиеся по количеству ионов как 12:4:2 [1].

Разупорядочение анионной подрешетки в кристалле LaF_3 происходит в области температур ≈ 180–460 К и продолжается до температуры плавления решетки. При этом в области ≈ 180–300 К разупорядочение решетки определяется движением в подрешетке ионов F_1, составляющих 2/3 от общего числа ионов фтора. Оставшиеся ионы фтора F_2 и F_3 образуют вместе с ионами металла базовые анионно–катионные плоскости. Подрешетки этих ионов разупорядочиваются при температурах, превышающих 400–420 К [1, 2].

Таким образом, уже в диэлектрической фазе за счет тепловой энергии ионы могут перемещаться в междоузлие или в близлежащее вакантное место решетки (узел), что и приводит к ионной проводимости. Результирующая удельная электропроводность такого кристалла, при воздействии внешнего электрического поля E может быть выражена следующим уравнением [2]:

$$\sigma = q\, n\, \mu \tag{1}$$

где q, n и μ – заряд, концентрация и подвижность носителей заряда (ионов), которая зависит от энергии активации движения заряда E_m. В общем случае электропроводность в ионных кристаллах является термоактивационным процессом и ее зависимость от температуры подчиняется уравнению Аррениуса [1, 5]:

$$\sigma = \sigma_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_m}{kT}\right) \tag{2}$$

где σ_0 – проводимость при определенной (обычно комнатной) температуре, T - температура, k – постоянная Больцмана. Таким образом, электропроводность в суперионных кристаллах зависит от концентрации и подвижности основных носителей заряда - ионов. Зависимость этих величин от температуры выражаются аналогичными (2) зависимостями [5]:

$$n(T) = n_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{kT}\right), \tag{3}$$

$$\mu(T) = \mu_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_m}{kT}\right), \tag{4}$$

где n_0 и μ_0 - концентрация и подвижность ионов при комнатной температуре, а E_a - энергия образования подвижных ионов.

Традиционно применяемые экспериментальные методы на основе комбинационного рассеяния света и ЯМР позволяют установить величины энергии E_a и E_m при единичных актах переноса ионов. К настоящему времени известно, что в кристаллах LaF_3 эти значения энергий E_a и E_m лежат в интервале 0.2–0.6 эВ [1-4]. В первом приближении эти величины определяются кулоновским взаимодействием и существенно зависят от взаимного расположения соответствующих ионов [1, 5]. При воздействии упругой деформации, создаваемой акустической волной, образуются области сжатия и растяжения, изменяется взаимное расположение ионов и, в результате, будут локально изменяться величины E_a и E_m, что в свою очередь должно привести к изменению концентрации носителей заряда и их подвижности [8]. Численный эксперимент проводился для случая, когда перемещение иона F_1 происходит последовательно с шагом 0.03 нм вдоль оси [100]. Для непосредственного вычисления величин E_a и E_m был применен полуэмпирический метод PM7 [9]. Взаимное расположение ионов лантана и фтора при деформации в зоне растяжения вдоль оси [001] показано на рисунке 1.

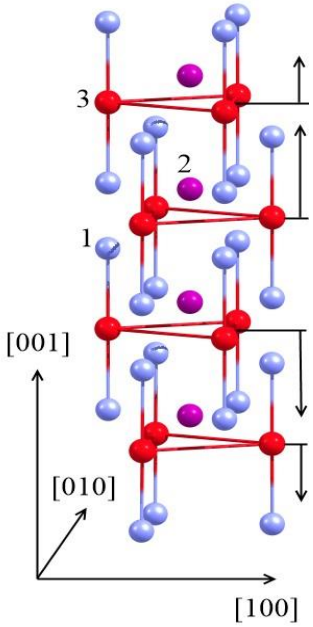


Рисунок 1. Взаимное расположение ионов фтора типа F_1 (1), типа F_2 (2) и лантана (3) в решетке LaF_3, при деформации в зоне растяжения вдоль оси [001]. Стрелками указано направление деформации.

Расчеты проводились в предположении, что за счет акустической волны, распространяющейся вдоль оси [001] создается упругая деформация, изменяющаяся по гармоническому закону то есть кристаллическая решетка деформируется с периодом, равным длине волны звука.

В таком деформированном кристалле исследовался процесс образования дефекта Френкеля типа узел-междоузлие, при котором ион фтора типа F_1 перемещался в междоузлие, образованное ионами фтора F_2 [1, 2]. На каждом шаге перемещения иона F_1 вычислялась энергия образования кристаллической решетки для этих состояний. Затем, используя значения этих энергий, вычислялся энергетический барьер, преодолеваемый ионом. Расчеты проводились для трех моделей кристаллической решетки LaF_3, имеющих форму параллелепипеда с линейными размерами. 3.5×2.0×2.2 nm. Первая модель представляла собой идеальную кристаллическую решетку до деформации. В двух других моделях учитывалось смещение анионно-катионных плоскостей в направлении [001].

Так, для 2-й модели, в зоне растяжения решетки вдоль оси Z, плоскости, ближайшие к плоскости перемещения иона, принимались раздвинутыми вдоль этой оси на 0.075 Å (1% от постоянной решетки *c*). Следующие за ними плоскости (выше и ниже соответственно) брались раздвинутыми на 0.0325 Å (на 0,5% относительно постоянной решетки). Для 3-й модели аналогичным образом вместо растяжения учитывалось сжимающее смещение анионно-катионных плоскостей вдоль оси [001] относительно плоскости перемещения ионов фтора на 1% и 0.5%, соответственно.

Результаты и их обсуждение. Результаты исследования приведены на рисунке 2, на котором показано изменение энергетического барьера, который преодолевает ион фтора F_1 на пути к междоузлию, образованному ионами F_2 при деформации кристалла вдоль оси [001]. Зависимости ***1*** соответствует идеальная решетка LaF_3, кривым 2 и 3 – соответственно 2-я и 3-я модели решетки.

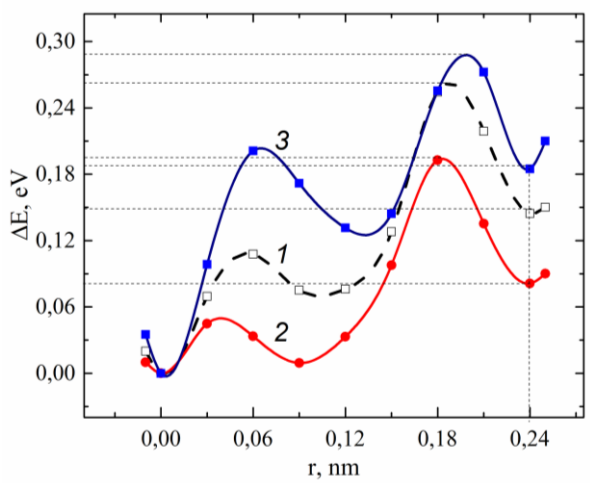


Рисунок 2. Изменение энергетического барьера при перемещении иона F_1 в междоузлие вдоль оси [100] в отсутствие деформации (1), при растяжении (2) и сжатии (3) вдоль оси [001] в кристалле трифторида лантана.

Из рисунка видно, что чем сильнее растяжение кристаллической решетки (раздвижение анионно-катионных плоскостей), тем меньше значения E_a и E_m. В то же время деформация сжатия приводит к росту этих параметров. Так если для идеальной решетки E_{a0}=0,15 эВ, то в случае с максимальным раздвижением плоскостей (зависимость 2) этот параметр Ea_1 равен 0,08 эВ. В случае максимального сжатия (зависимость 3) параметр Ea_2 равен 0,18 эВ. Значения энергии активации движения в идеальной решетке равно 0,26 эВ (E_{m0}), при раздвижении анионно-катионных плоскостей - 0,19 эВ (E_{m1}) и при их сближении - 0,28 эВ (E_{m2}). Полученные результаты модельных расчетов соответствуют движению ионов в диэлектрической фазе, что имеет место при температурах примерно ниже 250 К [1]. На основе полученных значений E_a и выражения (3) определено отношение концентрации ионов в зоне растяжения - n^1(T) к концентрации носителей в идеальной решетке - n^0(T):

$$\frac{n^1(T)}{n^0(T)} = \frac{n_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_{a1}}{kT}\right)}{n_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_{a0}}{kT}\right)} \approx 39.7 \cdot \qquad (5)$$

Таким образом концентрация носителей заряда в зоне растяжения увеличивается примерно в 40 раз.

Далее, на основе полученных значений Em и выражения (4) определено отношение подвижности ионов в зоне растяжения - μ^1(T) к подвижности носителей в идеальной решетке - μ^0(T):

$$\frac{\mu^1(T)}{\mu^0(T)} = \frac{\mu_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_{m1}}{kT}\right)}{\mu_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_{m0}}{kT}\right)} \approx 25, \qquad (6)$$

В результате, согласно выражению (1), в зоне растяжения упругая деформация может увеличивать локальную ионную проводимость на три порядка.

Аналогично для зоны сжатия, определено отношение концентрации ионов в зоне сжатия – n^2(T) к концентрации носителей в идеальной решетке - n^0(T):

$$\frac{n^2(T)}{n^0(T)} = \frac{n_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_{a2}}{kT}\right)}{n_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_{a0}}{kT}\right)} \approx \frac{1}{2.5}, \qquad (7)$$

Что касается изменения подвижности зарядов в зоне сжатия, то, используя величины E_{m0} и выражение (4) было определено изменение подвижности зарядов при сжатии:

$$\frac{\mu^2(T)}{\mu^0(T)} = \frac{\mu_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_{m2}}{kT}\right)}{\mu_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_{m0}}{kT}\right)} \approx \frac{1}{2.5}. \quad (8)$$

Расчеты показали, что в зоне деформации сжатия по сравнению с идеальным кристаллом как концентрация носителей заряда n^2(T), так и подвижность зарядов μ^2(T) уменьшаются примерно в 2.5 раза.

Таким образом, в кристаллах трифторида лантана, находящихся в диэлектрической фазе, концентрация носителей заряда и их подвижность при воздействии упругой деформации сильно увеличиваются в зоне растяжения и относительно слабо уменьшаются в зоне сжатия и согласно выражениям (1), (3) и (4), в зоне растяжения локальная ионная проводимость, соответственно, увеличивается на три порядка, а в зоне сжатия – уменьшается примерно в 6 раз. Поскольку основным показателем суперионной фазы является именно разупорядочение ионов фтора (в первую очередь – ионов типа F_1), и их способность к перемещению на макроскопические расстояния, то значит, в зонах деформации растяжения суперионное состояние в кристаллах трифторида лантана наступает при более низкой температуре.

Заключение. Исследования показали, что в случае смещения анионно-катионных плоскостей под действием упругой деформации концентрация носителей заряда и их подвижность могут сильно отличаться в областях сжатия или растяжения. В результате появляются зоны повышенной и пониженной концентрации и подвижности носителей заряда. В этих зонах, чередующихся с периодом, равным полудлине акустической волны, вызывающей деформацию, ионная проводимость может различаться на три порядка.

Таким образом, появляется возможность управления ионной проводимостью за счет упругой деформации, в отличие от традиционно используемых термических способов. При этом существенно расширяется диапазон рабочих температур приборов, разрабатываемых на основе суперионных кристаллов трифторида лантана.

Литература

1. Гуревич Ю.Я., Харкац Ю.Н. Особенности термодинамики суперионных проводников. УФН. 1982, 136. № 4. С. 693–728.
2. Иванов-Шиц А.К., Мурин И.В. Ионика твердого тела. Т.2. СПб.: Изд-во С. Петерб. ун-та. 2009, 617 с.
3. Patro L.N., Hariharan K. Fast fluoride ion conducting materials in solid state ionics: An overview. Solid State Ionics. 2013, 239. P. 41-49.
4. Escudero, A., Carrillo-Carrión, C., Zyuzin, M.V. *et al.* Luminescent Rare-earth-based Nanoparticles: A Summarized Overview of their Synthesis, Functionalization, and Applications. Top Curr Chem (Z). 2016, 374, P. 48-68.
5. Сорокин Н.И., Соболев Б.П. Собственная фтор-ионная проводимость кристаллических матриц фторидных суперионикоов: BaF_2 (тип флюорита) и LaF_3 (тип тисонита). Физика твердого тела. 2019, 61, No.1, С. 53-58.
6. Rongeat C. Reddy M. A., Witter R., Fichtne M. Solid Electrolytes for Fluoride Ion Batteries: Ionic Conductivity in Polycrystalline Tysonite-Type Fluorides. Applied Mater. Interfaces. 2014, 6, P. 2103−2110.
7. Aniya M., Sadakuni H., Hirano E. Ionic Conductors: Effect of Temperature on Conductivity and Mechanical Properties and Their Interrelations. Crystals. 2021, 11, P.1008-1023.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости. М.: Физматлит, 2003, 264 с.
9. Stewart, J.J.P., Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters. Journal of Molecular Modeling. 2013, 19, P. 1-32.