

ISSN 2521-6368

Volume 5
Number 2
2022

Journal of Baku Engineering University

P H Y S I C S

Journal is published twice a year
Number - 1. June, Number - 2. December

An International Journal

<http://journal.beu.edu.az>

Founder

Havar Mammadov

Editor-in-chief

Niftali Qocayev

Co-Editor

Razim Bayramov

Editorial advisory board

Azer Ahmedov (Baku State University, Azerbaijan)
Cahangir Huseynov (Azerbaijan, Azerbaijan Pedagogical University)
Eldar Qocayev (Azerbaijan, Technical University)
Eldar Masimov (Azerbaijan, Baku State University)
Enver Nakhmedov (Baku Engineering University)
Eyyub Guliyev (Azerbaijan, National Academy of Sciences)
Farhad Rustamov (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)

Gulnara Akhverdiyeva (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Izzet Efendiyeva (Azerbaijan, Baku State University)
Larisa Ismayilova (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Kerim Allahverdiyev (Azerbaijan, National Aviation Academy Of Azerbaijan)
Namiq Ahmedov (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Sajida Abdulvahabova (Azerbaijan, Baku State University)

International Advisory board

Ahmed Abdinov (Azerbaijan, Baku State University)
Anar Rustamov (Germany, Hote Frankfurt University)
Ali Javan (USA, Massachusetts Institute of Technology)
Adil R. Abduragimov (USA, University of California, Los Angeles)
Amrulla Mamedov (Turkey, BilkentUniversit)
Faig Mikailzade (Turkey, Gebze Technical University, Kocaeli)
Gulshen Agayeva (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Irada Aliyeva (Azerbaijan, Baku State University)
Garib Murshudov (York Akademy, UK, London)
Hamed Sari-Sarraf (USA, Texas Technik University)
Eden Mamut (Romania, Black Sea Universiteties Network Center)
Elsen Veli Veliyev (Turkey, Kocaeli University)
Edil Eyvazov (Azerbaijan, Azerbaijan Pedagogical University)
Kamran T. Mahmudov (University of Lisbon, Porugal)
Kev Salihov (Tataristan, Kazan University)
Khalil Kälantär (Displays and Optical Technologies, Japan, Tokio)
Konstantin Voldemarovich Shaitan (Russia, Moskov State University)
M.Iqbal Choudhary (University of Karachi, Pakistan)
Natiq M. Atakishiyev (Universidad National Antonoma de Mexico)
Nizami Gasanliy (Middle East Technical University, Turkey)
Oktai Gassumov (Azerbaijan National Academy of Sceince, Baku)

Oguz Gulseren (Bilkent University, Turkey)
Olgun Guven (Turkey, Hacettepe University)
Rasim Mamedov (Azerbaijan, Baku State University)
Rauf Jafarov (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Sebahattin Tuzemen (Turkey, Ataturk University)
Sevim Akyuz (Turkey, Istanbul University)
S.V. Chernyshenko (Germany, Koblenz University)
Suleyman I. Allahverdiyev (Russian, Akademy Science, Moscow)
Svetlana Demuhamedova (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Takhmasib Aliyev (METU, Ankara, Turkey)
Taleh Yusifov (University of California, USA, Los Angeles)
Tariel Ismayilov (Azerbaijan, Baku State University)
Tarlan Efendiyev (Belarus, National Academy of Science)
Toshi Nagata (Japan, National Institute for Natural Science)
V. Thavasi (Singapore, National University of Singapore)
Vanin A.F. (Russia, National Academy of Science)
Vagif Nasirov (Azerbaijan, Azerbaijan Pedagogical University)
Vladimir Pashenko (Russia, Moskov State University)
Veli Gusseyinov (National Academy of Science, Baku, Azerbaijan)
Vladimir Gorbarchuk (Poland, Lyubel Polytechnic University)
Yusuf Sahin (Turkey, Ataturk University)

Executive Editors

Shafag Alizade

Assistant Editors

Ulker Agayeva

Lala Hajiyeva

Design

Ilham Aliyev

Contact address

Journal of Baku Engineering University
AZ0102, Khirdalan city, Hasan Aliyev str. 120, Absheron, Baku, Azerbaijan
Tel: 00 994 12 - 349 99 95 **Fax:** 00 994 12 349-99-90/91

e-mail: jr-physics@beu.edu.az

web: <http://journal.beu.edu.az>

facebook: Journal Of Baku Engineering University

Copyright © Baku Engineering University

ISSN 2521-6368

ISSN 2521-6368



Journal of Baku Engineering University

PHYSICS

Baku - AZERBAIJAN

Journal of Baku Engineering University

PHYSICS

2021. Volume 5, Number 2

CONTENTS

**CALCULATION OF THERMAL-PHYSICAL PARAMETERS
OF In₂Se₃ CRYSTAL FROM AB-INITIO PRINCIPLES**

E. M. Gojaev, Z. A. Jahangirli, A. F. Garibli _____69

**DFT ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ
ПРОИЗВОДНОГО ДИХЛОРДИАЗАДИЕНА C₁₇H₁₇Cl₂N₃**

Светлана Демухамедова _____75

**ELEKTRON CİHAZLARI ÜÇÜN Ni₃Sn₄ ƏSASINDA KONTAKT
MATERİALLARININ ALINMASI VƏ ONLARIN BƏZİ İSTİLİK-FİZİKİ XASSƏLƏRİ**

Səyyarə Heydər qızı Sadıqova _____85

UOT 621.315.592PAC:65.40.-b

CALCULATION OF THERMAL-PHYSICAL PARAMETERS OF In_2Se_3 CRYSTAL FROM AB-INITO PRINCIPLES

E. M. GOJAEV¹, Z. A. JAHANGIRLI^{2,3}, A. F. GARIBLI⁴

¹Azerbaijan Technical University

²Institute of Physics of Azerbaijan National Academy of Sciences

³Baku State University

⁴Sumgait State University

geldar-04@mail.ru, zakircahangirli@yahoo.com, aysel.garibli25@gmail.com

ABSTRACT

Theoretical methods in the article – Density Functional Theory (DFT), the heat capacities of semiconductor substances based on the value of the theoretically calculated constant molar heat capacity of the In_2Se_3 compound through the oscillation frequency of the atoms that make them up, the heat capacity, free energy, entropy, enthalpy of that compound in a constant volume in the temperature range of 0-640K information on theoretically calculated results of temperature dependences is reflected. Theoretical calculations were performed using the ABINIT package using norm-conserving Hartwigsen-Goedecker-Hutter ion pseudopotentials in the Local Density Approximation of the Density Functional Excitation Theory. Exchange-correlation effects were calculated using the Ceperley-Alder-Perdew-Zunger scheme. The maximum kinetic energy used in the separation of wave functions into plane waves is 40 Ha.

The results of the calculations were found to be in good agreement with other results related to the In_2Se_3 compound.

Keywords: In_2Se_3 , DFT, C_v heat capacity, S entropy, enthalpy

РАСЧЕТ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛА In_2Se_3 ПО ПРИНЦИПАМ АВ-ИНИТО

РЕЗЮМЕ

Теоретические методы в статье – Теория функционала плотности (ТФП), теплоемкости полупроводниковых веществ на основе значения теоретически рассчитанной постоянной молярной теплоемкости соединения In_2Se_3 через частоту колебаний составляющих их атомов, теплоемкость, свободной энергии, энтропии, энтальпии этого соединения в постоянном объеме в интервале температур 0-640K отражена информация о теоретически рассчитанных результатах температурных зависимостей. Теоретические расчеты проводились с использованием пакета ABINIT с использованием сохраняющих норму псевдопотенциалов ионов Хартвигсена-Гедеккера-Хаттера в приближении локальной плотности теории функционального возбуждения плотности. Обменно-корреляционные эффекты рассчитывали по схеме Сеперли-Алдера-Пердью-Цунгера. Максимальная кинетическая энергия, используемая при разделении волновых функций на плоские волны, составляет 40 га.

Результаты расчетов оказались в хорошем согласии с другими результатами, относящимися к соединению In_2Se_3 .

Ключевые слова: In_2Se_3 , ТФП, C_v -теплоемкость, S -энтропия, энтальпия.

**In_2Se_3 KRISTALININ ISTILIK –FIZIKI PARAMETRLƏRİNİN
AB-INITO PRINSIPLƏRİNDƏN HESABLANMASI**

XÜLASƏ

Məqalədə nəzəri metodlar – Sıxlıq Funksionalı Nəzəriyyəsi (DFT) yarımkəçirici maddələrin istilik tutumları onları təşkil edən atomların rəqsi hərəkət tezliyi vasitəsilə In_2Se_3 birləşməsinin nəzəri hesablanmış sabit molyar istilik tutumunun qiymətinə əsasən 0-640K temperatur intervalında həmin birləşmənin sabit həcmdə istilik tutumunun, sərbəst enerjisinin, entropiyasının, entalpiyasının temperatur asılılıqları nəzəri olaraq hesablanmış nəticələr barədə məlumatlar öz əksini tapmışdır. Nəzəri hesablamalar Funksional Sıxlıq Həyəcanlaşma Nəzəriyyəsinin Lokal Sıxlıq Yaxınlaşmasında normanı qoruyan Hartwigsen-Goedecker-Hutter ion psevdopotensialları tətbiq edilməklə ABINIT paket-proqramı vasitəsilə yerinə yetirilmişdir. Mübadilə-korelyasiya effektləri Ceperley-Alder-Perdew-Zunger sxemi

ilə hesablanmışdır. Dalğa funksiyalarının müstəvi dalğalar üzrə ayrılışında istifadə olunan maksimal kinetik enerji 40 Ha təşkil edir.

Hesablamaların nəticələri In_2Se_3 birləşməsinə aid digər nəticələrlə yaxşı uzlaşması aşkar edilmişdir.

Açar sözlər: In_2Se_3 , DFT, C_v istilik tutumu, S entropiya, entalpiya

Introduction

The In_2Se_3 semiconductor compound is attracting attention as a new semiconductor material for photovoltaic solar cells [1], ion batteries [2], photodetectors [3, 4], RAM and DRAM (dynamic) random access memory, and thermoelectric materials.

In_2Se_3 volumetric crystals are characterized by various modifications of the crystal structure, they are more heterogeneous and do not have mirror surfaces. Due to the technological difficulties of growing single crystals, these crystals are still poorly studied.

Thermodynamic functions of semiconductors - entropy, molar heat capacity, Helmholtz free energy and change of enthalpy depending on temperature - are quantities that characterize the stability and resilience of substances at different temperatures and pressures. On the other hand, the above-mentioned thermodynamic functions make it possible to detect the direction and rate of occurrence of chemical reactions, as well as the possibility of phase transitions in a certain pressure and temperature range. In addition, thermodynamic functions also allow determining the mechanism of phase transitions. Using thermodynamic functions and thermodynamic laws, it allows to relate the stability of various modifications of matter with interatomic force constants, oscillation frequency and amplitude of matter atoms.

Currently developed theoretical methods - Density Functional Theory (DFT) allow to calculate the heat capacities of semiconductor substances through the oscillation frequency of the atoms that make them up. Using these frequencies, it is possible to precalculate the contribution of the crystal lattice to the total heat capacity of the substance, the Debye characteristic temperature, and the properties of substances with similar composition and crystalline structure. The Density Functional Theory provides a theoretical calculation of the heat capacity of solids from low temperatures to room temperature and, therefore, purposeful conduct of experimental studies.

Research method

Theoretical calculations were performed using the ABINIT package [6] by applying norm-preserving Hartwigsen-Goedecker-Hutter ion pseudopotentials [5] in the Local Density Approximation of the Density Functional Excitation Theory. Exchange-correlation effects were calculated by the Ceperley-Alder-Perdew-Zunger [7] scheme. The maximum kinetic energy used in the separation of plane wave functions on kinetic energy is 40 Ha.

We know that the thermodynamic functions of semiconductors are mainly determined by the degree of free oscillation of the lattice. These thermodynamic quantities are calculated using the phonon spectrum and the phonon density of states. Using the phonon density of states $g(\omega)$ in the quasi-harmonic approximation, the temperature dependence of the molar heat capacity $C_v(T)$ at constant volume is determined by the following formulas:

$$C_V(T) = 3nNk_B \int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 e^{-\hbar\omega/k_B T}}{\left(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1\right)^2} d\omega \quad (1)$$

or

$$C_V = D(\theta/T) = 9R(T/\theta)^3 \int_0^{\theta/T} \frac{(\theta/T)^4 \exp(\theta/T) d(\theta/T)}{[\exp(\theta/T) - 1]^2} d(\theta/T). \quad (2)$$

where, n - is the number of atoms in one molecule ($n=5$), k_B - is the Boltzmann constant, $g(\omega)$ - is the normalized phonon state density, ω_{\max} - is the maximum phonon frequency, N - is the normalizing factor calculated in the harmonic approximation, θ - is the Debye temperature.

The theoretically calculated graph of the molar heat capacity at constant volume in the temperature range of 0÷400K is given in Figure 1. As can be seen from the graph, the molar heat capacity of the In_2Se_3 semiconductor varies at temperatures below 5.4 K according to the T^3 cubic law of Debye.

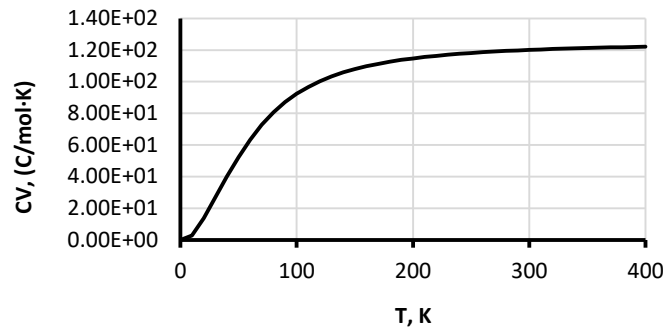


Figure 1. Temperature dependence of the molar heat capacity of the In_2Se_3 compound at constant volume calculated from the first- principles.

Based on the value of heat capacity at constant pressure, thermal physical parameters of In_2Se_3 compound are calculated. For this, the above-mentioned mathematical formulas (1), (2) are used.

Figures 2 and 3 show the temperature dependence of the molar free energy and entropy of In_2Se_3 semiconductor, respectively. It is known that the steady state of equilibrium in a system with constant temperature and volume corresponds to the minimum of the Helmholtz free energy. In other words, macroscopic parameters (for example, pressure) remain constant at the minimum point for such a system.

As is known, at absolute zero temperature, the internal energy and enthalpy are not equal to zero even in the stable single crystal phase, in other words, in this case it has "0 energy". If we change the stable solid phase to another phase at this temperature, then a small ΔE_{tr} will be added to the internal energy. In the absence of a phase transition of internal energy, the change of internal energy is determined by the following formula:

$$\Delta E_{(0 \rightarrow T)} = \int_0^T C_V dT, \quad \Delta E_{(T_1 \rightarrow T_2)} = \int_{T_1}^{T_2} C_V dT \quad (3)$$

where C_V is the molar heat capacity at constant volume and when $E_T = E_0 + \Delta E_{(0 \rightarrow T)}$ is defined as $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V$ (C/mol·K). ΔE expressed by the formula (3) causes the oscillation amplitude of atoms to increase the oscillation energy of the crystal lattice, the increase of the internal energy of electron levels, the increase of the rotation movement of the group of atoms, etc. is spent. In the case of molecular lattice, the internal energy of the molecules also increases. $A_\alpha = A_\beta$ type solid-liquid, liquid-gas type transitions can occur with the increase of temperature. At this time ΔE_{tr} transition energy is absorbed and this energy is determined by the following formula:

$$\Delta E_{(0 \rightarrow T_r)} = \int_0^{T_r} C_V dT + \Delta E_{tr} \quad (4)$$

At constant pressure, the increase in phase enthalpy occurs by a similar mechanism:

$$\Delta H_{(0 \rightarrow T)} = \int_0^T C_P dT, \quad \Delta H_{(T_1 \rightarrow T_2)} = \int_{T_1}^{T_2} C_P dT \quad (5)$$

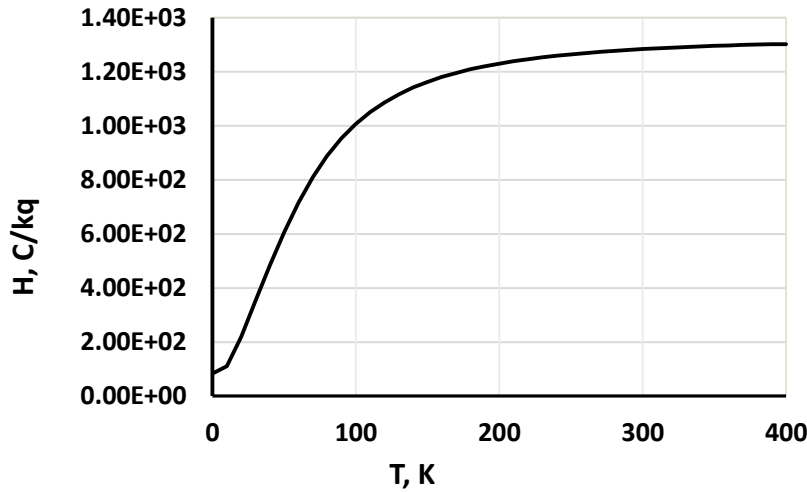


Figure 2. Temperature dependence of the enthalpy of In_2Se_3 calculated from first-principles

If the reaction in the system occurs with a change in enthalpy, then this change will be determined by the formula $\Delta H_T = \Delta G_T + \Delta L_T$ C/mol, where ΔL_T is the change in binding energy. Thus, the Gibbs free energy can be calculated using the following formula:

$$\Delta G_T = \Delta H_T - T\Delta S, \quad \Delta G_T = - \left[\Delta S - \frac{\Delta H}{T} \right]. \quad (6)$$

During any rotating process, the increase in energy of the system is equal to the energy dH .

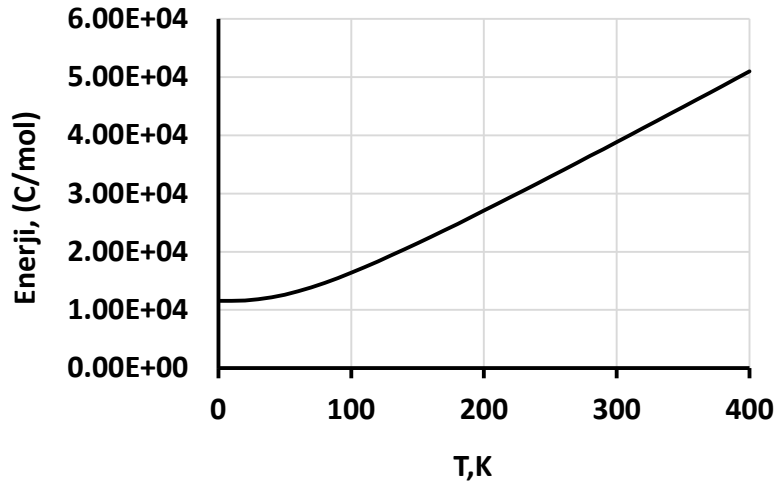


Figure 3. Temperature dependence of the molar free energy of In_2Se_3 calculated from first-principles

On the other hand, the degree of defectivity of semiconductor crystal structures is directly related to entropy. By defining entropy theoretically, it is possible to study various activation processes, the formation of vacancies and various types of defects, and the migration of atoms. If certain energy is supplied by the medium to a phase with heat capacity C_p , then the temperature of the phase increases by dT , then the energy supplied to the phase is determined by the formula $dH = C_p dT$, where $dS = \frac{dH}{T} = \frac{C_p}{T} dT$.

Accordingly, the entropy change during heating of a substance from zero degrees to a certain temperature T or from T_1 to T_2 is determined by the following formula:

$$\Delta S_{(0 \rightarrow T)} = \int_0^T \frac{C_p}{T} dT, \quad \Delta S_{(T_1 \rightarrow T_2)} = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT \quad (7)$$

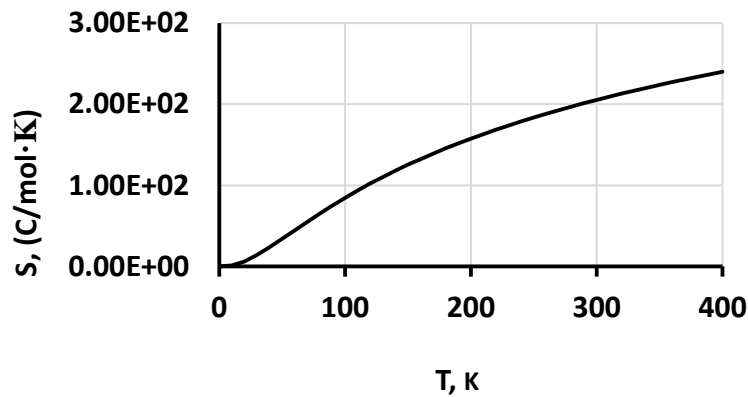


Figure 4. Temperature dependence of the molar entropy of In_2Se_3 calculated from first-principles.

These microscopic processes, in turn, characterize macroscopic effects such as melting and sublimation. Using these theoretically calculated results, it is also possible to predict phase transitions and state diagrams.

The result

The molar heat capacity at constant volume was theoretically calculated in the temperature range 0÷400K by means of the Density Functional Excitation Theory in the quasi-harmonic approximation. It is shown that Debye's law (T^3 dependence of C_V at low temperatures) is satisfied in the temperature range 0÷3K for the In_2Se_3 semiconductor. At temperatures above 300 K, the heat capacity obeys the classical Dulong-Pty law. In the temperature dependence of heat capacity, anharmonicity is observed at temperatures above 250K.

REFERENCES

1. J. Herrero, J. Ortega, Electrochemical synthesis of photoactive In_2Se_3 thin films Solar Energy Materials, Volume 16, Issue 6, December 1987, Pages 477-485
2. M.S. Whittingan, Chemistry of intercalation compounds: Metal guests in chalcogenide hosts, Progress in Solid State Chemistry, Volume 12, Issue 1, 1978, Pages 41-99
3. Q. Li, Y. Li, J. Gao, S. Wang, X. Sun, High performance single In_2Se_3 nanowire photodetector, Applied Physics Letters, Volume 99, Issue 24, 2011, page 3105
4. T. Zhai, X. Fang, M. Liao, X. Xu, L. Li, B. Liu, Y. Koide, Y. Ma, J. Yao, Y. Bando, Fabrication of high-quality In_2Se_3 nanowire arrays toward high-performance visible-light photodetectors ACS Nano, Volume 4, Issue 3, 2010, Pages 1596-1602
5. C. Hartwigsen, S. Goedecker, J. Hutter, Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn, Physical Review B, Volume 58, Issue 7, August 1998, page 3641
6. X. Gonze, J.M. Beuken, R. Caracas et al. First-principles computation of material properties: the ABINIT software project, Computational Materials Science, Volume 25, 2002, Pages 478-492.
7. J.P. Perdew, A. Zunger, Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, Physical Review B, Volume 23, Issue 10, May 1981, Page 5048

UOT 539.193; 542.8; 544.14; 544.15PACS: 31.15.E-

DFT İSSELDÖVƏNİE STRUKTURU İE REAKTSİONNÖY SPOİBÖNÖTİ PROİZVÖDÖNÖY DİKLÖR DİAZADİENƏ C₁₇H₁₇Cl₂N₃

SVEFLƏNƏ DEÖUXƏMEÖÖVƏ

İnstitut fizikisik problemler, Bakinskiy gosudarstvenniy universitet

ul. 3. Xəlilova, 23, AZ 1148, g. Baku, Azerbaydjan

svetlanabest@mail.ru

ƏNÖTƏTSİYƏ

V predstavlennoy rabote issledovano prostранstvennoe i elektronnoe stroenie novosintezirovannogo soedineniya (E)-4-(2,2-dichloro-1-(p-tolyldiazenyl)vinylyl)-N,N-dimethylaniline, yavlyayetsya proizvodnym diklorodiazadiena, priнаdлежащего к классу азо-гидразонных материалов, имеющим широкий спектр применения в органической и координационной химии, а также в медицине. Расчеты проводились в газовой и в водной средах квантовохимическим методом в рамках теории функционала электронной плотности (DFT) на основе гибридного трехпараметрического функционала B3LYP и базисного набора 6-31G с использованием пакета прикладных компьютерных программ Gaussian 09. Для визуализации полученных результатов использована программа GaussView 6.0.16. Вычислены геометрические параметры, значения электронной энергии, дипольные моменты, величины парциальных зарядов на атомах, энергии HOMO и LUMO орбиталей, дескрипторы реакционной способности молекулы. Расчеты показывают, что предложенная модель молекулы образует стабильную структуру. Проанализированы структурные и электронные перестройки в молекуле и изменения различных параметров в зависимости от диэлектрической проницаемости среды.

Ключевые слова: DFT расчеты, пространственная структура, дескрипторы реакционной способности

DİKLÖR DİAZADİYEN MOLEKULUNUN TÖRƏMƏSİNİN C₁₇H₁₇Cl₂N₃ QURULUŞUNUN VƏ REAKTSİYƏ QƏBİLİYYƏTİNİN DFT ÜSÜLÜ İLƏ TƏDQIQI

XÜLƏSƏ

Təqdim olunan işdə üzvi və koordinasiya kimyasında, eləcə də tibbdə geniş tətbiq sahəsinə malik olan azo-hidrazon sinfinə aid diklorodiazadiyen törəməsi olan yeni sintez olunmuş (E)-4-(2,2-dichloro-1-(p-tolyldiazenyl)vinylyl)-N,N-dimethylaniline birləşməsinin fəza və elektron quruluşu tədqiq edilmişdir. Hesablamalar qaz və su mühitində kvantkimyəvi üsulu ilə hibrid üçparametrlili B3LYP funksionala və 6-31G bazis dəstinə əsaslanan elektron sıxlığının funksional nəzəriyyəsi çərçivəsində (DFT) Gaussian 09 proqram paketindən istifadə edərək aparılmışdır. Nəticələrin vizualizasiyası üçün GaussView 6.0.16 proqramından istifadə edilmişdir. Molekulun həndəsi parametrləri, elektron enerjisi, dipol momentlərinin, atomların nöqtəvi yüklərinin qiymətləri, HOMO və LUMO orbitallarının enerjiləri, reaksiyaya qırmə qəbiliyyətini xarakterizə edən deskriptorlar hesablanmışdır. Hesablamalar göstərir ki, molekulun təklif olunan modeli sabit struktur əmələ gətirir. Molekulda struktur və elektron çevrilmələr, mühitin dielektrik keçiriciliyindən asılı olaraq müxtəlif parametrlərin dəyişmələri təhlil edilmişdir.

Açar sözlər: DFT hesablamalar, fəza quruluşu, reaktivlik deskriptorları

DFT STUDY OF THE STRUCTURE AND REACTIVITY OF DİCHLORODİAZADİENE DERİVATIVE C₁₇H₁₇Cl₂N₃

ABSTRACT

In this work, the spatial and electronic structure of the newly synthesized compound (E)-4-(2,2-dichloro-1-(p-tolyldiazenyl)vinylyl)-N,N-dimethylaniline, which is a derivative of dichlorodiazadiene, belonging to the class of azo-hydrazone materials with a wide range of applications in organic and coordination chemistry, as well as in medicine was investigated. The calculations were carried out in gaseous and aqueous media by the quantum-chemical method within the framework of the electron density functional theory (DFT) based on the B3LYP hybrid three-parameter functional and the 6-31G basis set using the Gaussian 09 software package. GaussView 6.0.16 was used to visualize the

obtained results. The geometric parameters, electronic energy, values of dipole moments, of partial charges on atoms, energies of HOMO and LUMO orbitals, reactivity descriptors were calculated for the molecule. The calculations show that the proposed model of the molecule forms a stable structure. The structural and electronic rearrangements in the molecule, and changes in various parameters depending on the dielectric constant of the medium are analyzed.

Keywords: DFT calculations, spatial structure, reactivity descriptors

Введение

Исследуемая молекула $C_{17}H_{17}Cl_2N_3$ - (E)-4-(2,2-dichloro-1-(p-tolyldiazenyl)vinyl)-N,N-dimethylaniline принадлежит к классу соединений, синтезированных в лаборатории тонкого органического синтеза Бакинского Государственного Университета на основе реакции N-замещенных гидразонов с CCl_4 в присутствии катализатора $CuCl$. Синтезированное соединение является производным дихлордиазадена и принадлежит к классу азо-гидразонных материалов, которые, благодаря своим структурным свойствам, обладают широким спектром полифункциональной активности и имеют большое практическое применение для органической и координационной химии, а также, учитывая их уникальные биологические свойства, для медицины [1-8]. Азо-гидразоновые материалы широко используются в качестве лигандов, сенсоров, жидких кристаллов, нелинейных оптических материалов, материалов для оптического хранения данных, материалов, изменяющих цвет, молекулярных переключателей и т.д. [8-16]. В качестве исходных материалов азо-гидразоновые лиганды используются в процессе синтеза координационных и супрамолекулярных соединений [17-21], благодаря донорно-акцепторной способности их нековалентных взаимодействий [22,23]. Функциональные свойства азо-гидразонных материалов в большой степени зависят от функциональных групп, присоединенных к азо-группе. Удачно подобранные заместители помогут улучшить функциональные свойства и биологическую активность координационных соединений, созданию которых они могут способствовать [24-28]. В исследуемом соединении особый интерес представляет функциональная дихлорэтиленовая группа с галогеновыми заместителями CCl_2 , нековалентное донорно-акцепторное взаимодействие которой представляет интерес из-за высокой координационной способности. Известно, что нековалентные взаимодействия играют очень существенную роль в стабилизации структуры. Строение синтезированного титульного соединения установлено методом ЯМР. С целью изучения пространственной и электронной структуры титульного соединения, его реакционной способности и определения электронодонорных и акцепторных взаимодействий, нами было проведено данное исследование.

Методы расчета

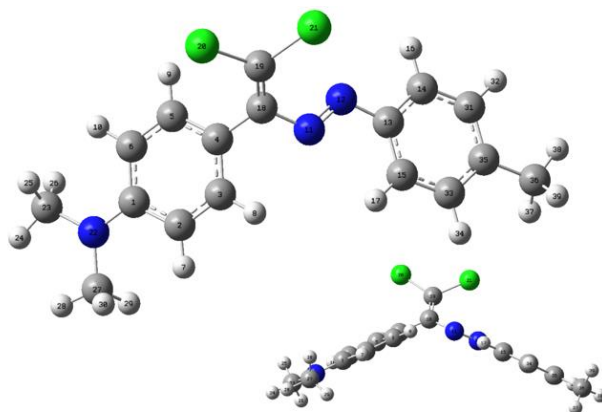
Пространственная и электронная структура молекулы $C_{17}H_{17}Cl_2N_3$ исследована квантово-химическим методом в рамках теории функционала электронной плотности DFT. Энергия основного состояния системы взаимодействующих частиц в методе DFT представляется как однозначный функционал, зависящий только от плотности частиц. Поскольку электронная плотность является функцией лишь трех пространственных координат, а многоэлектронная волновая функция в методе Хартри-Фока зависит от $3N$ переменных, получаем существенное упрощение задачи при решении стационарного уравнения Шредингера в приближении Борна-Оппенгеймера и, следовательно, значительно более быстрое решение задач для многоатомных молекул. Методы DFT, включающие нелокаль-

ный обменный потенциал Хартри-Фока, называются гибридными методами. Наиболее широко используется гибридный трехпараметрический обменный функционал Беке с корреляционным функционалом Ли-Янга-Парра B3LYP (Becke, Lee, Yang, Parr). Метод DFT/B3LYP является достаточно надежным и широко применяется при исследовании химических и биологических молекул и их комплексов. С учетом корреляции электронов в широком базисе методы теории функционала плотности обеспечивают точность, сравнимую с неэмпирическими расчетами, а зачастую и превосходящую их. В нашей работе все расчеты осуществлялись с использованием гибридного функционала B3LYP и базисного набора 6-31G. Расчеты проводились в газовой и водной средах. Учет влияния растворителя - воды реализован в рамках поляризуемой континуальной модели PCM ($\epsilon = 78,36$). Все вычисления выполнены с использованием пакета прикладных компьютерных программ Gaussian 09 [29]. Для визуализации полученных результатов использована программа GaussView 6.0.16 [30].

Результаты и обсуждения

На рис.1 представлена структура исследуемой молекулы, оптимизированная методом теории функционала плотности DFT с гибридным функционалом B3LYP и расширенным базисным набором 6-31G.

Рис. 1. Оптимизированная модель молекулы $C_{17}H_{17}Cl_2N_3$, оптимизированной на уровне DFT/B3LYP/6-31 G



Поворот молекулы на 90° подтверждает плоское расположение колец, две цепочки которых располагаются под углом относительно дихлорэтиленовой группы $>C=CCl_2$. На основе проведенного квантовохимического расчета получены геометрические, энергетические и электронные параметры титульной молекулы.

Таблица 1. Длины связей молекулы $C_{17}H_{17}Cl_2N_3$

Атом	Газовая фаза	Водная среда	Атом	Газовая фаза	Водная среда	Атом	Газовая фаза	Водная среда
C1C2	1.4184	1.422	C13C14	1.4013	1.4032	C23H24	1.0909	1.0898
C1C6	1.4185	1.4223	C13C15	1.4076	1.4092	C23H25	1.0988	1.0978
C2C3	1.3905	1.3901	C14C31	1.3962	1.3962	C23H26	1.0992	1.0981
C5C6	1.3908	1.3905	C15C33	1.3905	1.3903	C27H28	1.0909	1.0898
C3C4	1.4087	1.4108	C31C35	1.4047	1.4059	C27H29	1.099	1.098
C4C5	1.4071	1.4092	C33C35	1.4123	1.4139	C27H30	1.099	1.0979
C2H7	1.0823	1.082	C15H17	1.0833	1.0832	C36H37	1.0973	1.0972
C3H8	1.0832	1.0836	C14H16	1.0841	1.0843	C36H38	1.094	1.0934

C5H9	1.0837	1.0841	C31H32	1.0856	1.0851	C36H39	1.0976	1.0969
C6H10	1.0821	1.082	C33H34	1.0866	1.0859	C1N22	1.3884	1.3814
C4C18	1.4822	1.4805	C35C36	1.5112	1.5099	N22C23	1.4621	1.4664
N11C18	1.432	1.4331	C18=C19	1.351	1.35	N22C27	1.4618	1.4662
N11=N12	1.2716	1.2735	C19C120	1.815	1.817	R(9,20)	2.8762	
N12C13	1.425	1.4226	C19C121	1.8019	1.8087			

В таблицах 1 и 2 приведены геометрические параметры титульной молекулы, полученные в результате оптимизации методом DFT/B3LYP /6-31G. Оптимизированные длины связей в основном принимают стандартные значения. Длина связей C-C в бензольных кольцах ~ 1.4 Å, незначительно удлиняясь на 0.02Å со стороны присоединения тяжелой группы NC₂H₆ на связях C₁C₆ и C₁C₂. Двойная связь C₁₈C₁₉ = 1.35 Å, а одинарные связи C₄C₁₈=1.48 Å и C₃₅C₃₆ =1.51 Å. Длина связей CCl=1.81 Å. Длина двойной связи в азо-группе N₁₁N₁₂=1.27 Å, одинарные CN связи немного отличаются в сотых долях: N₁₂C₁₃=1.42, N₁₁C₁₈=1.43, N₂₂C₁=1.39 Å, а N₂₂C₂₃ и N₂₂C₂₇ равны 1.46Å. Все связи C-H ~ 1.1 Å. Водная среда не изменила длины связей молекулы, наибольшие изменения коснулись укорочения на 0.007Å связи C₁N₂₂ и, соответственно, удлинения связей N₂₂C₂₃ и N₂₂C₂₇ на 0.004 Å.

В таблице 2 приведены основные нековалентные взаимодействия молекулы C₁₇H₁₇Cl₂N₃. Несмотря на то, что атом хлора редко образует водородные связи, в молекуле C₁₇H₁₇Cl₂N₃ взаимодействие атома хлора Cl₂₀ с атомом водорода бензольного кольца H₉ приводит к образованию водородной связи длиной 2.876 Å в газовой и 2.915 Å в водной среде. Также (табл. 2) наблюдаются нековалентные электростатические взаимодействия между валентно несвязанными атомами водородов H₈ и H₁₇ с атомом азота азо-группы N₁₁. Как видим, водная среда незначительно уменьшает эти взаимодействия, увеличивая соответствующие контакты H \cdots A (табл. 2).

Таблица 2. Нековалентные взаимодействия молекулы C₁₇H₁₇Cl₂N₃

DH \cdots A		DH	H \cdots A	D \cdots A	\angle DHA
C5H9 \cdots Cl20	Газовая фаза	1.08369	2.87623	3.26491	101.21607
	Водная среда	1.08414	2.91502 \uparrow	3.28651	100.28431
C15H17 \cdots N11	Газовая фаза	1.08325	2.51306	2.78714	92.94036
	Водная среда	1.08322	2.52589 \uparrow	2.799291	92.58553
C3H8 \cdots N11	Газовая фаза	1.08325	2.56730	2.84044	93.12959
	Водная среда	1.08364	2.59665 \uparrow	2.85495	92.38160

В таблице 3 приведены значения валентных и основных двугранных углов титульной молекулы. В дихлорэтиленовой группе валентный угол между атомами хлора Cl₂₀C₁₉Cl₂₁ составляет 111.2°, угол C₁₈C₁₉Cl₂₁ равен 125.2°, а угол C₁₈C₁₉Cl₂₀, уменьшается на 2° благодаря сильному взаимодействию атома Cl₂₀ с атомом водорода H₉ бензольного кольца. Угол C₄C₁₈C₁₉ равен 125.42° и на 2.85° больше угла N₁₁C₁₈C₁₉. В метильных группах все углы CCH $\sim 111^\circ$.

Таблица 3. Валентные и двугранные углы молекулы C₁₇H₁₇Cl₂N₃

	Газовая фаза	Водная среда		Газовая фаза	Водная среда
Валентные углы					
C4C18N11	111.70767	111.93693	C4C18C19	125.41900	125.42615
C18N11N12	118.38342	118.25513	C4C5H9	119.69665	119.76785
N11N12C13	116.05223	116.41064	C6C5H9	118.85054	118.76464
N12C13C14	115.28251	115.32913	C1C6H10	120.34449	120.27214
N12C13C15	124.78845	124.75161	C5C6H10	118.62628	118.66661
C5C4C18	122.25788	122.15495	C4C3H8	119.06219	119.28925
C3C4C18	119.97897	120.05487	C2C3H8	119.46687	119.23314
C6C1N22	121.29026	121.34883	C1C2H7	120.33883	120.29126
C2C1N22	121.31648	121.37383	C2C1N22	121.31648	121.37383
Cl20C19Cl21	111.23778	111.11857	C13C15H17	119.12525	119.48171
C18C19Cl21	125.24702	125.09143	C33C15H17	121.31446	120.97427
C18C19Cl20	123.22790	123.49750	C13C14H15	118.30898	118.66136
N11C18Cl19	122.57034	122.36923	C31C14H16	121.64957	121.28013
Двугранные углы					
C5C4C18N11	-138.51762	-137.17222	C6C1N22C27	179.20065	179.29403
C4C18N11N12	134.98918	131.34575	C5C4C18C19	47.69667	48.68070
C18N11N12C13	178.11746	178.79789	N12N11C18C19	-51.01938	-54.30032
N11N12C13C14	177.67988	177.54056	C4C18C19Cl20	6.97130	7.27692
C6C1N22C23	-0.84547	-0.32015	N11C18C19Cl21	7.12250	6.93739

В водной среде сохраняется такая же картина, но из-за незначительного уменьшения прочности водородной связи C₅H₉...Cl₂₀ угол C₁₈C₁₉Cl₂₀ увеличивается на 0,2°. Наличие молекул растворителя незначительно уменьшает нековалентные взаимодействия близлежащих атомов водорода бензольного кольца H₁₇ и H₈ с атомом азота N₁₁ и атома C₁₆ с атомами хлора Cl₂₁ и азота N₁₂.

Это влияние прослеживается также в таблице 3, где соответствующие контакты ослабляются в водной среде, что приводит к незначительным изменениям в значениях валентных углов. Изменение взаимодействий в водной среде в наибольшей степени проявляется в увеличении на 0,36° валентных углов N₁₁N₁₂C₁₃, C₁₃C₁₅H₁₇ и C₁₃C₁₄H₁₆ и уменьшении на 0,34° и 0,37° валентных углов C₃₃C₁₅H₁₇ и C₃₁C₁₄H₁₆. Валентный угол C₃C₄C₁₈ в водной среде увеличивается на 0,08° также из-за ослабления нековалентного взаимодействия атомов H₈ и N₁₁.

Как видно из рисунка 1, молекула имеет плоскую структуру ароматических колец и присоединенных с ней азо и NC₂H₆ групп, которые соединены под валентным углом C₄C₁₈N₁₁, равным 111,71° в газовой фазе, увеличивающимся в водной среде на 0,23°. Двугранные углы основной цепи C₁₈N₁₁N₁₂C₁₃ и N₁₁N₁₂C₁₃C₁₄ находятся в чисто транс положении, структура сворачивается двугранными углами C₅C₄C₁₈N₁₁ и C₄C₁₈N₁₁N₁₂, равными соответственно -138,5° и 135,0° в газовой среде, в водной среде эти углы уменьшаются соответственно на 1,35° и 3,64°. Двугранные углы C₄C₁₈C₁₉Cl₂₀ и N₁₁C₁₈C₁₉Cl₂₁, ответственные за расположение дихлорэтиленовой группы >C=CCl₂ в пространстве относительно основной цепи ~ 7°.

Таблица 4. Заряды Малликена молекулы $C_{17}H_{17}Cl_2N_3$

atom	gaz	water	atom	gaz	water	atom	gaz	water
1 C	0.354035	0.344196	13 C	0.128233	0.127653	22 N	-0.627768	-0.6278
2 C	-0.163305	-0.177914	14 C	-0.086560	-0.0987	23 C	-0.232722	-0.2415
3 C	-0.131894	-0.148993	15 C	-0.056140	-0.0684	24 H	0.143899	0.1639
4 C	0.051406	0.040686	31 C	-0.171308	-0.180473	25 H	0.156641	0.16222
5 C	-0.128122	-0.144764	33 C	-0.175568	-0.181250	26 H	0.154533	0.1618
6 C	-0.165628	-0.179665	35 C	0.129686	0.121648	27 C	-0.231989	-0.241089
7 H	0.122246	0.147048	16 H	0.153381	0.1585	28 H	0.143936	0.163816
8 H	0.146251	0.154767	17 H	0.160361	0.1678	29 H	0.154429	0.161779
9 H	0.144526	0.152904	32 H	0.130486	0.153169	30 H	0.155206	0.161979
10 H	0.124664	0.147966	34 H	0.129804	0.153816	36 C	-0.484991	-0.486629
18 C	0.283520	0.2792	19 C	-0.524183	-0.5237	37 H	0.158629	0.169642
11 N	-0.252715	-0.254936	20 Cl	0.117888	0.1029	38 H	0.148594	0.158508
12 N	-0.259936	-0.280844	21 Cl	0.139945	0.1120	39 H	0.160529	0.168801

В таблице 4 приведены заряды Малликена на атомах исследуемой молекулы, довольно удобные для качественной оценки распределения зарядов. В обоих бензольных кольцах положительный заряд наблюдается только на атомах углерода, у которых водород замещен на любую функциональную группу атомов. На атоме C_1 , к которому присоединена тяжелая группа NC_2H_6 , заряд 0.344 ед.заряда, на атоме C_4 в месте присоединения дихлорэтиленовой группы $>C=CCl_2$ - самый маленький положительный заряд 0.051 ед.заряда, а в другом бензольном кольце на атоме C_{13} в месте замещения на азо-группу заряд 0.128, а на атоме C_{35} , где замещение происходит на метильную группу - заряд 0.130 ед.заряда. У атомов водорода бензольного кольца заряды на атомах H_7 и H_{10} равны 0.12, на атомах H_{32} и H_{39} по 0.13, а у атомов водорода, взаимодействующих с атомами хлора и азота заряд повышается: 0.14 на H_8 и H_9 , 0.15 на H_{16} и 0.16 на H_{17} . В функциональной группе $>C=CCl_2$ на атоме C_{18} заряд равен 0.283 ед.заряда, а на атоме C_{19} заряд отрицательный, равный -0.524. На атоме хлора, образующем водородную связь с атомом H_9 , заряд 0.118, а на другом атоме хлора заряд 0.140 ед.заряда. В функциональной группе NC_2H_6 на атоме азота заряд равен -0.628 ед.заряда, на углеродах -0.23, на водородах 0.15 ед.заряда. В метильной группе заряд на атоме C_{36} равен -0.485 ед.заряда, на атомах водорода H_{37} и H_{39} ~ 0.16, а на атоме H_{38} ~ 0.15 ед.заряда.

При размещении молекулы в водной среде заряды на атомах углерода незначительно уменьшаются, а на атомах водорода увеличиваются. Наибольшее понижение на 0.02 ед.заряда наблюдается на атомах C_3 и C_5 бензольных колец, а наибольшее повышение на 0.02 ед.заряда на атомах водорода H_7 , H_{10} , H_{32} , H_{34} , H_{24} и H_{28} . На 0.02 ед.заряда уменьшается заряд на атоме азота N_{12} азо-группы, а на атомах хлора Cl_{21} и Cl_{20} заряд уменьшается на 0.03 и 0.01 ед.заряда соответственно.

В таблице 5 приведены энергетические и электронные параметры молекулы $C_{17}H_{17}Cl_2N_3$, полученные в результате оптимизации методом DFT/B3LYP с базисным набором 6-31G. Сравнение электронной энергии в водной и газовой средах показал, что в водной среде структура оказалась на 0.279 eV более низкоэнергетической. В таблице приведены значения наиболее важных пограничных молекулярных орбиталей: НОМО – высшая занятая молекулярная орбиталь и LUMO - низшая вакантная молекулярная орбиталь. Ввиду наибольшей доступности этих орбиталей для электрофилов и нуклеофилов соответственно, анализ этих молекулярных орбиталей позволяет изучить химические свойства молекул. Математически из значений энергий пограничных

орбиталей можно получить индексы реакционной способности молекулы, которые коррелируют с ее конкретными свойствами и дают полезную информацию, связанную с физико-химическими свойствами.

Энергетический зазор между орбиталями основного (HOMO) и возбужденного (LUMO) состояний дает информацию о стабильности структуры. Чем меньше энергетическая щель, тем молекула менее стабильна – обладает высокой химической реактивностью, высокой поляризуемостью, и называется мягкой молекулой [31].

Энергия ионизации - фундаментальный показатель химической активности атомов и молекул: высокое значение характеризует высокую стабильность и химическую инертность, а малое значение - высокую реакционную способность [32]. Согласно теореме Купманса [33] первая энергия ионизации молекулярной системы равна отрицательному значению энергии HOMO орбитали: $I = -E_{\text{HOMO}}$, а сродство к электрону определяется как отрицательное значение LUMO орбитали: $A = -E_{\text{LUMO}}$. В наших расчетах потенциал ионизации и сродство к электрону в водной среде титульной молекулы увеличивается соответственно на 0.12 eV и 0.306 eV (табл.5).

Важным параметром для предсказания активности молекулы является электроотрицательность $\chi = (I+A)/2$. Согласно принципу Сандерсона [34] перенос электрона между двумя системами продолжается до выравнивания их электроотрицательностей. Химический потенциал $\mu = -(I+A)/2$ - величина, обратная электроотрицательности. Стабильность и влияние гетероатома (в данном соединении это атомы азота и хлора), на реакционную способность можно описывать химической твердостью $\eta = (I-A)/2$ и химической мягкостью $S = 1/2\eta$. На способность молекулы принимать электроны от реагента указывает индекс электрофильности $\omega = \mu^2/2\eta$. Молекула с низким (большим отрицательным) химическим потенциалом и малой твердостью является хорошим электрофилом.

Таблица 5. Энергетические и электронные параметры и индексы реакционной способности для молекулы $C_{17}H_{17}Cl_2N_3$ (в eV).

Параметры	Gas phase	Aqueous phase	Δ
Электронная энергия	-47411.962 eV	-47412.241 eV	0.279↓
HOMO	-5.1089	-5.2289	0.12↓
LUMO	-2.225	-2.531	0.306↓
Energy gap ΔE	2.8839	2.6979	0.186↓
Сродство к электрону (A)	2.225	2.531	0.306↑
Потенциал ионизации (I)	5.1089	5.2289	0.12↑
Электроотрицательность (χ)	3.66695	3.87995	0.213↑
Твердость (η)	1.44195	1.34895	0.093↓
Мягкость (S)	0.34675266	0.37065866	0.023906↑
Химический потенциал (μ)	-3.66695	-3.87995	0.213↓
Индекс электрофильности (ω)	4.66261739	5.57989992	0.917↑
Нуклеофильность (ν)	0.21447181	0.17921468	0.03525713↓
Максимальный перенос заряда (ΔN)	2.54304934	2.87627414	0.33322476↑
Поляризуемость (α)	7059.0566092	9465.2280216	2406.171↑
Дипольный момент (Debye)	5.560843	7.615445	2.054602↑

Все вычисленные для молекулы $C_{17}H_{17}Cl_2N_3$ глобальные дескрипторы реакционной способности в газовой и водной средах приведены в таблице 5. Уменьшение в водной среде энергетической щели на 0.186 eV (табл.5), химического потенциала на 0.213 eV и

твердости на 0.093 eV говорит об увеличении ее реакционной способности. В водной среде молекула становится мягче, что характерно для среды растворителя и увеличивается ее способность принимать электроны, что подтверждается увеличением в водной среде электроотрицательности и электрофильности на 0.213 eV. Нуклеофильность $\nu = 1/\omega$ - физическая величина, обратно пропорциональная электрофильности. В водной среде у титульной молекулы нуклеофильность уменьшается на 0.35 eV.

Важным глобальным дескриптором является максимальный перенос заряда $\Delta N = -\mu/\eta$, означающий максимальное количество электронного заряда, которое может принять электрофильная система. У молекулы $C_{17}H_{17}Cl_2N_3$ в водной среде ΔN повышается на 0.33 eV.

Уменьшение в водной среде энергетической щели приводит к увеличению поляризуемости на 2406.171 eV, фактически к увеличению деформации электронной плотности, что также свидетельствует об увеличении химической активности.

Еще одним важным параметром, характеризующим электронное поведение молекулы, является дипольный момент. Небольшое его значение может указывать на компактность структуры, а высокое значение дипольного момента предполагает сильное взаимодействие. У молекулы $C_{17}H_{17}Cl_2N_3$ в водной среде дипольный момент увеличивается на 2.05 eV.

Заключение

На основе проведенных расчетов проанализированы структурные и энергетические характеристики оптимизированных структур исследуемой молекулы, включая геометрические и энергетические параметры, энергии НОМО и LUMO орбиталей, величины дипольных моментов, заряды на атомах молекулы, а также дескрипторы реакционной способности. Полученные в работе результаты, в частности, исследование реакционной способности новосинтезированной молекулы $C_{17}H_{17}Cl_2N_3$, могут быть полезными при моделировании возможных комплексов молекул этого класса с различными реагентами и белками в процессе поиска новых лекарственных препаратов и соединений, имеющих большое практическое применение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Mahmoudi, G., Bauzá, A., Gurbanov, A. V., Zubkov, F. I., Maniukiewicz, W., Rodríguez-Diéguez, A., López-Torres, E. & Frontera, A. *The role of unconventional stacking interactions in the supramolecular assemblies of Hg(II) coordination compounds*. CrystEngComm., **2016**, Vol. 18, pp. 9056–9066. DOI: 10.1039/c6ce02073a
2. Mahmoudi, G., Dey, L., Chowdhury, H., Bauzá, A., Ghosh, B. K., Kirillov, A. M., Seth, S. K., Gurbanov, A. V. & Frontera, A. *Synthesis and crystal structures of three new lead(II) isonicotinoylhydrazones: anion controlled nuclearity and dimensionality*. Inorg. Chim. Acta., **2017**, Vol. 461, pp. 192–205. DOI: 10.1016/j.ica.2017.02.021
3. Mahmoudi, G., Gurbanov, A. V., Rodríguez-Hermida, S., Carballo, R., Amini, M., Bacchi, A., Mitoraj, M. P., Sagan, F., Kukułka, M. & Safin, D. A. *Ligand-Driven Coordination Sphere-Induced Engineering of Hybrid Materials Constructed from PbCl₂ and Bis-Pyridyl Organic Linkers for Single-Component Light-Emitting Phosphors*. Inorg. Chem., **2017**, Vol. 56, pp. 9698–9709. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b01189.
4. Mahmoudi, G., Zareba, J. K., Gurbanov, A. V., Bauzá, A., Zubkov, F. I., Kubicki, M., Stilinović, V., Kinzhybalov, V. & Frontera, A. *Benzyl Dihydrazone versus Thiosemicarbazone Schiff Base: Effects on the Supramolecular Arrangement of Cobalt Thiocyanate Complexes and the Generation of CoN₆ and CoN₄S₂ Coordination Spheres*. Eur. J. Inorg. Chem., **2017**, Vol. 2017, No. 40, pp. 4763–4772. DOI: 10.1002/ejic.201700955

5. Mahmoudi, G., Seth, S. K., Bauzá, A., Zubkov, F. I., Gurbanov, A. V., White, J., Stilinović, V., Doert, T. & Frontera, A. *Pb...X (X = N, S, I) Tetrel bonding interactions in Pb(II) complexes: X-ray characterization, hirshfeld surfaces and DFT calculations*. CrystEngComm., **2018**, Vol. 20, pp. 2812–2821. DOI: 10.1039/C8CE00110C
6. Mahmoudi, G., Zangrando, E., Mitoraj, M. P., Gurbanov, A. V., Zubkov, F. I., Moosavifar, M., Konyaeva, I. A., Kirillov, A. M. & Safin, D. A. *Extended lead(II) architectures engineered: via tetrel bonding interaction*. New J. Chem., **2018**, Vol. 42, pp. 4959–4971. DOI: 10.1039/C8NJ00525G
7. Mahmoudi, G., Khandar, A. A., Afkhami, F. A., Mirosław, B., Gurbanov, A. V., Zubkov, F. I., Kennedy, A., Franconetti, A. & Frontera, A. *Modulation of coordination in pincer-type isonicotinohydrazone schiff base ligands by proton transfer*. CrystEngComm., **2019**, Vol. 21, pp. 108–117. DOI: 10.1039/C8CE01580E
8. Viswanathan, A., Kute, D., Musa, A., Mani, S. K., Sipilä, V., Emmert-Streib, F., Zubkov, F. I., Gurbanov, A. V., Yli-Harja, O. & Kandhavelu, M. *2-(2-(2,4-dioxopentan-3-ylidene)hydrazinyl)benzotrile as novel inhibitor of receptor tyrosine kinase and PI3K/AKT/mTOR signaling pathway in glioblastoma*. Eur. J. Med. Chem., **2019**, Vol. 166, pp.291-303. DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.01.021
9. H. Zollinger. *Diazo Chemistry I: Aromatic and Heteroaromatic Compounds*. VCH, Weinheim. **1994**, 457 P.
10. H. Zollinger. *Diazo Chemistry II: Aliphatic, Inorganic and Organometallic Compounds*, VCH, Weinheim. **1995**, 538 P.
11. C. Sourisseau Chem. *Polarization Measurements in Macro- and Micro-Raman Spectroscopies: Molecular Orientations in Thin Films and Azo-Dye Containing Polymer Systems*. Chem.Rev., **2004**, Vol. 104, No. 9, pp. 3851-3892. DOI:10.1021/cr030042g
12. R. N. Dsouza, U. Pischel and W. M. Nau. *Fluorescent dyes and their supramolecular host/guest complexes with macrocycles in aqueous solution*. Chem. Rev., **2011**, Vol. 111, No. 12, pp. 7941-7980. DOI: 10.1021/cr200213s.
13. A. Natansohn and P. Rochon. *Photoinduced motions in azo-containing polymers*. Chem. Rev., **2002**, Vol. 102, No. 11, pp. 4139-4175. DOI: 10.1021/cr970155y
14. A. A. Beharry and G. A. Woolley. *Azobenzene photoswitches for biomolecules*. Chem. Soc. Rev., **2011**, Vol.40 No.8, pp. 4422-4437. DOI: 10.1039/C1CS15023E
15. Mahmudov, K. T. & Pombeiro, A. J. L. *Resonance-Assisted Hydrogen Bonding as a Driving Force in Synthesis and a Synthon in the Design of Materials*. Chem. Eur. J., **2016**, Vol.22, pp.16356–16398. DOI: 10.1002/chem.201601766
16. Maharramov, A. M., Shikhaliyev, N. Q., Suleymanova, G. T., Gurbanov, A. V., Babayeva, G. V., Mammadova, G. Z., Zubkov, F. I., Nenajdenko, V. G., Mahmudov, K. T. & Pombeiro, A. J. L. *Phenol, halogen and hydrogen bonds in (E)-1-(2,2-dichloro-1-(2-nitrophenyl)vinyl)-2-(para-substituted phenyl)-diazenes*. Dyes Pigments, **2018**, Vol.159, pp.135–141. DOI:10.1016/j.dyepig.2018.06.022
17. Ma, Z., Mahmudov, K. T., Aliyeva, V. A., Gurbanov, A. V. & Pombeiro, A. J. L. *TEMPO in metal complex catalysis*. Coord. Chem. Rev., **2020**, Vol.423, p.213482. DOI: 10.1016/j.ccr.2020.213482
18. Ma, Z., Mahmudov, K. T., Aliyeva, V. A., Gurbanov, A. V., Guedes da Silva, M. F. C. & Pombeiro, A. J. L. *Peroxides in metal complex catalysis*. Coord. Chem. Rev., **2021**, Vol.437, p.213859. DOI:10.1016/j.ccr.2021.213859
19. Mahmudov, K. T., Kopylovich, M. N., Haukka, M., Mahmudova, G. S., Esmaila, E. F., Chyragov, F. M. & Pombeiro, A. J. L. *Aqua complex of iron (III) and 5-chloro-3-(2-(4, 4-dimethyl-2, 6-dioxocyclohexylidene) hydrazinyl)-2-hydroxybenzenesulfonate: Structure and catalytic activity in Henry reaction*. J. Mol. Struct., **2013**, Vol.1048, pp.108–112. DOI: 10.1016/j.molstruc.2013.05.041
20. Sutradhar, M., Martins, L. M. D. R. S., Guedes da Silva, M. F. C., Mahmudov, K. T., Liu, C.-M. & Pombeiro, A. J. L. *Trinuclear Cu^{II} Structural Isomers: Coordination, Magnetism, Electrochemistry and Catalytic Activity towards the Oxidation of Alkanes*. Eur. J. Inorg. Chem., **2015**, Vol.2015, No.23, pp. 3959–3969. DOI: 10.1002/ejic.201500440
21. Sutradhar, M., Alegria, E. C. B. A., Mahmudov, K. T., Guedes da Silva, M. F. C. & Pombeiro, A. J. L. *Iron (III) and cobalt (III) complexes with both tautomeric (keto and enol) forms of aroylhydrazone ligands: Catalysts for the microwave assisted oxidation of alcohols*. RSC Adv., **2016**, Vol.6, No. 10, 8079–8088. DOI: 10.1039/C5RA25774C
22. Gurbanov, A. V., Kuznetsov, M. L., Demukhamedova, S. D., Aliyeva, I. N., Godjaev, N. M., Zubkov, F. I., Mahmudov, K. T. & Pombeiro, A. J. L. *Role of substituents on resonance assisted hydrogen bonding vs. intermolecular hydrogen bonding*. CrystEngComm, **2020**, Vol.22, No. 4, pp.628–633. DOI: 10.1039/c9ce01744e
23. Asgarova, A. R., Khalilov, A. N., Brito, I., Maharramov, A. M., Shikhaliyev, N. G., Cisterna, J., Cárdenas, A., Gurbanov, A. V., Zubkov, F. I. & Mahmudov, K. T. *Hydrogen and halogen bonding in the haloetherification products in chalcone*. Acta Cryst., **2019**, Vol. C75, pp.342–347. DOI: 10.1107/S2053229619001025
24. Mizar, A., Guedes da Silva, M. F. C., Kopylovich, M. N., Mukherjee, S., Mahmudov, K. T. & Pombeiro, A. J. L.

- Water-Soluble Copper(II) Complexes with a Sulfonic-Functionalized Arylhydrazone of β -Diketone and Their Application in Peroxidative Allylic Oxidation of Cyclohexene.* Eur. J. Inorg. Chem., **2012**, Vol.2012, No.13, pp. 2305–2313. DOI: 10.1002/ejic.201101361
25. MacLeod, T. C., Kopylovich, M. N., Guedes da Silva, M. F. C., Mahmudov, K. T. & Pombeiro, A. J. L. Copper(II) complexes of arylhydrazones of β -diketones immobilized on Zn–Al layered double hydroxides as effective recyclable catalysts for peroxidative oxidation of alkanes. Appl. Catal. A-Gen., **2012**, Vol. 439–440, p. 15–23. DOI: 10.1016/j.apcata.2012.06.032
26. Karmakar, A., Rúbio, G. M. D. M., Paul, A., Guedes da Silva, M. F. C., Mahmudov, K. T., Guseinov, F. I., Carabineiro, S. A. C. & Pombeiro, A. J. L. *Lanthanide Metal Organic Frameworks based on dicarboxylfunctionalized arylhydrazone of barbituric acid: Syntheses, Structures, Luminescence and Catalytic Aldehydes Cyanosilylation.* Dalton Trans., **2017**, Vol. 46, pp. 8649–8657. DOI: 10.1039/C7DT01056G
27. Shikhaliyev, N. Q., Kuznetsov, M. L., Maharramov, A. M., Gurbanov, A. V., Ahmadova, N. E., Nenajdenko, V. G., Mahmudov, K. T. & Pombeiro, A. J. L. *Noncovalent interactions in the design of bis-azo dyes.* CrystEngComm, **2019**, Vol.21, pp. 5032–5038. DOI: 10.1039/C9CE00956F.
28. Gurbanov, A. V., Kuznetsov, M. L., Mahmudov, K. T., Pombeiro, A. J. L. & Resnati, G. *Resonance Assisted Chalcogen Bonding as a New Synthone in the Design of Dyes.* Chem. Eur. J., **2020**, Vol.26, No.65, pp.14833–14837. DOI: 10.1002/chem.202002518
29. Gaussian 09, Revision D.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, **2013**.
30. Dennington, R., Keith, T.A., and Millam, J.M. Gauss View, Version 6.0.16. Semichem Inc., Shawnee Mission, KS, **2016**
31. Fleming I., *Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions*, John Wiley and Sons, New York, **1976**, 249 P.
32. Chakraborty T. Gazi K., Ghosh D.C. *Computation of the atomic radii through the conjoint action of the effective nuclear charge and the ionization energy.* Mol. Phys., **2010**, Vol.108, No.16, pp.2081–2092. DOI: 10.1080/00268976.2010.505208
33. T. Koopmans, *Über die Zuordnung von Wellenfunktionen und Eigenwerten zu den Einzelnen Elektronen Eines Atoms.* Physica, **1934**, Vol. 1, No.1-6, pp.104–113. DOI:10.1016/s0031-8914(34)90011-2
34. Sanderson, R.T. *Principle of electronegativity. Part I. General nature.* J. Chem. Educ. Soc., **1988**, Vol.65, No.2, pp.112–118.

PAC:65.40.-bUOT: 615.53.09.09

ELEKTRON CİHAZLARI ÜÇÜN Ni_3Sn_4 ƏSASINDA KONTAKT MATERİALLARININ ALINMASI VƏ ONLARIN BƏZİ İSTİLİK-FİZİKİ XASSƏLƏRİ

SƏYYARƏ HEYDƏR qızı SADIQOVA

Azərbaycan Texniki Universiteti

Bakı / Azərbaycan

seyyare.sadiqova@aztu.edu.az

XÜLASƏ

Fiziki-kimyəvi analizlərin kompleks üsullarının tətbiqi ilə Ni_3Sn_4 -Bi sistemi tədqiq edilərək onun hal diaqramının Ni_3Sn_4 birləşməsi tərəfdən bir hissəsi qurulmuşdur. Aşkar edilmişdir ki, metallik bismut Ni_3Sn_4 birləşməsində həll olma sərhədi 300 K-də 1 mol% olan bərk məhlul sahəsi yaradır. Hal diaqramının quruluşu hissəsindən məlum olmuşdur ki, sistem kvazistabil təbiətlidir. $(\text{Ni}_3\text{Sn}_4)_{0.99}\text{Bi}_{0.01}$ tərkibli bərk məhlulun xüsusi müqavimətinin və ümumi istilikkeçiriciliyinin temperatur asılılıqları öyrənilmişdir. Göstərilmişdir ki, xüsusi müqavimətin temperatur əmsalı 300-450 K temperatur intervalında $0,0036 \text{ K}^{-1}$ qiymətinə malikdir. Ümumi istilikkeçiriciliyinin temperatur asılılığı T^{-1} qanunu üzrə dəyişir.

Acar sözlər: hal diaqramı, bərk məhlul, müqavimətin temperatur əmsalı, istilikkeçiriciliyi

ПОЛУЧЕНИЕ КОНТАКТНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ Ni_3Sn_4 ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ И НЕКОТОРЫЕ ИХ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

АННОТАЦИЯ

Комплексными методами физико-химического анализа изучена система Ni_3Sn_4 -Bi и построена часть ее диаграммы состояния со стороны соединения Ni_3Sn_4 . Показано, что висмут, растворившись в соединении Ni_3Sn_4 , образует область твердых растворов с границей 1 мол.% при 300 К. Из построенной части диаграммы состояния определено, что система носит квазиустойчивый характер. Исследованы температурные зависимости удельного сопротивления и общей теплопроводности твердого раствора состава $(\text{Ni}_3\text{Sn}_4)_{0.99}\text{Bi}_{0.01}$. Показано, что в интервале температур 300-450 К температурный коэффициент удельного сопротивления имеет значение $0,0036 \text{ K}^{-1}$. Температурная зависимость общей теплопроводности изменяется по закону T^{-1} .

Ключевые слова: диаграмма состояния, твердый раствор, температурный коэффициент сопротивления, теплопроводность

OBTAINING CONTACT MATERIALS BASED ON Ni_3Sn_4 FOR ELECTRONIC DEVICES AND SOME OF THEIR THERMOPHYSICAL PROPERTIES

ABSTRACT

The Ni_3Sn_4 system was studied by complex methods of physicochemical analysis and a part of its state diagram from the side of the Ni_3Sn_4 compound was constructed. It was shown that bismuth, having dissolved in the Ni_3Sn_4 compound, forms a region of solid solutions with a boundary of 1 mol.% at 300 K. From the plotted part of the state diagram, it was determined that the system is quasi-stable. The temperature dependences of the resistivity and total thermal conductivity of the $(\text{Ni}_3\text{Sn}_4)_{0.99}\text{Bi}_{0.01}$ solid solution was studied. It was shown that in the temperature range of 300-450 K the temperature coefficient of resistivity has a value of 0.0036 K^{-1} . The temperature dependence of the total thermal conductivity changes according to the T^{-1} law.

Keywords: state diagram, solid solution, temperature coefficient of resistance, thermal conductivity

GIRIŞ

Qalay və onun birləşmələri elektron cihaz və sxemlərində aşqarlayıcı maddə, kontakt materialı, şəffaf keçirici təbəqə və s. bu kimi tətbiq sahəsi tapmışdır. Qalayın 3d-elementləri ilə olan birləşmələrində mexaniki davamlılıq və bərkliyi yüksəltməklə yanaşı, maqnit xassəli

ərintilər də almaq mümkündür. Bu səbəbdən onun yeni tərkibli və səmərəli xassəli birləşmə və bərk məhlullarının alınub tədqiq edilməsi elektron texnikası üçün aktual sayılır. Deyilənləri nəzərə alaraq, tərəfimizdən Ni_3Sn_4 birləşməsi əsas götürülərək Ni_3Sn_4 -Bi sisteminin Ni_3Sn_4 -lə zəngin olan ərintilərinin sintezi aparılmış, onların fiziki-kimyəvi və bəzi istilik-fiziki xassələri tədqiq edilmişdir. Ni_3Sn_4 birləşməsi az öyrənilmiş birləşmədir. Ədəbiyyat məlumatlarında onun yalnız alınması və əmələgəlməsinin təbiəti haqqında qısa məlumatlara rast gəlmək olur [1]. Sistemin ikinci komponenti Bi tərkibində n- və p-tip yükdaşıyıcılarının konsentrasiyasının eyni miqdarda olması ilə təsdiqlənir.

TƏCRÜBƏ METODİKASI

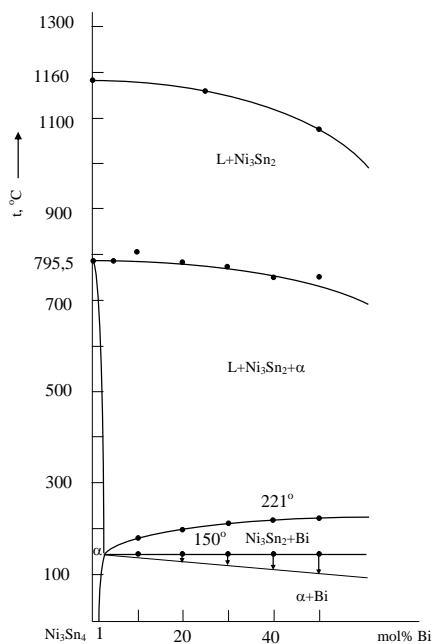
Ərintilər əvvəlcədən sintez edilmiş Ni_3Sn_4 birləşməsi ilə təmiz bismut elementinin birgə sintez edilməsi nəticəsində alınmışdır. Sintez prosesi ~ 1200 °C temperaturunda vibrasiyalı qarışdırma texnologiyası ilə yerinə yetirilmişdir. Komponentlər arasında baş verən qarşılıqlı təsir reaksiyalarının tam başa çatması və homogen tərkiblərin sabitləşdirilməsi məqsədilə ərintilər ~ 200 °C temperaturunda 480 saat termiki emalı aparılmışdır.

Fiziki-kimyəvi analiz tədqiqatları [2]-də verilən metodikaya əsasən yerinə yetirilmişdir. İstilik-fiziki xassələri polikristallik nümunələrdə kompensasiya üsulu ilə ölçülmüşdür [3,4]. Fiziki-kimyəvi analiz tədqiqatlarındakı ölçü xətası ~ 5 -7%, istilik-fiziki xassələrin ölçülməsindəki xətalər 7-9% olmuşdur.

EKSPERİMENTAL NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Fiziki-kimyəvi analizin nəticələri ümumiləşdirilərək Ni_3Sn_4 -Bi sisteminin hal diaqramının bir hissəsi qurulmuş (şəkil 1). Məlum olmuşdur ki, sistem kvazistabildir.

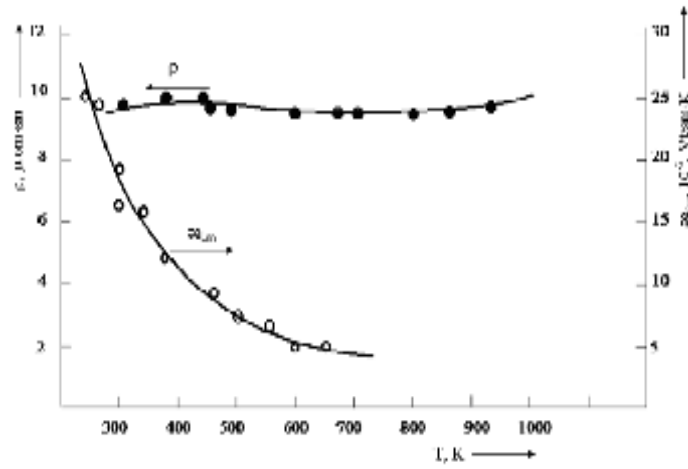
Ni-Sn binar sistemindən məlumdur ki, Ni_3Sn_4 inkonqruent əriyən birləşmədir və o, yüksək temperaturlarda, yəni ~ 1068 - 1423 K intervalında ($maye + Ni_3Sn_2$) qarışığı daxilində mövcud olur [1]. Bu səbəbdən, tərəfimizdən qurulan hal diaqramında da 1423 K-dən başlayaraq ~ 1068 K-ə qədər Ni_3Sn_2 birləşməsinin maye fazadan kristallaşması baş verir. Belə kristallaşma sahəsi təmiz bismut komponenti tərəfində daha kiçik temperaturlara (~ 500 K-ə kimi) uyğun gəlir ki, görünür bu da elementar bismutun çox aşağı ərimə temperaturuna malik olması ilə əlaqədardır.



Şəkil 1. Ni_3Sn_4 -Bi sisteminin Ni_3Sn_4 birləşməsi tərəfdən olan hal diaqramı

Sistemdə Ni_3Sn_2 -nin mövcudluğu bir qədər də aşağı temperaturlara qədər (~ 150 °C) davam edir və 150 °C -də baş verən bərkfazlı reaksiya nəticəsində otaq temperaturuna qədər Ni_3Sn_4 birləşməsinin α bərk məhlulu şəklində çökməsi baş verir. Əlbətdə, belə çökmə əmələgələn bərk məhlulun iştirakı ilə $\alpha+Bi$ qarışığı şəklində reallaşır. Bərk məhlulun sərhədi otaq temperaturunda $\sim 1,0$ mol% Bi tərtibindədir. Metalik Bi əsasında homogen sahənin mövcudluğu təcrübə olaraq müşahidə edilmir.

Ni_3Sn_4 əsasında aşkar edilən bərk məhlulların elektron cihazlarında kontakt materialı kimi tətbiq edilməsinin mümkünlüyünü müəyyənəlmək məqsədilə $(Ni_3Sn_4)_{0,99}Bi_{0,01}$ tərkibli bərk məhlulun xüsusi müqavimətinin temperatur asılılığı tədqiq edilmişdir. Məlum olmuşdur ki, $\rho \sim f(T)$ asılılığında cüzi artım müşahidə olunsada, temperaturun artması ilə ρ -nun gedişəti əsasən stabildir.



Şəkil 2. $(Ni_3Sn_4)_{0,99}Bi_{0,01}$ tərkibli bərk məhlulunun xüsusi müqavimətinin (ρ) və ümumi istilikkeçiriciliyinin ($\alpha_{\text{üm}}$) temperatur asılılığı

Xüsusi müqavimətin temperaturdan asılı olaraq dəyişməsi $300-450$ K temperatur intervalında bir qədər nəzərəcarpacaq dərəcədə baş verdiyindən, bu interval üçün müqavimətin temperatur əmsalının ($T\Theta\rho$) qiyməti hesablanmışdır; yəni $T\Theta\rho=0,0036$ K⁻¹ olmuşdur. Bu qiymət keçirici kontakt materiallarının analoji göstəricilərinə yaxındır [5].

Həmçinin məlumdur ki, cihazın işlədiyi zaman kontakt sahələrində istilik ayrılabilir. Bunu nəzərə alaraq $(Ni_3Sn_4)_{0,99}Bi_{0,01}$ ərintisinin ümumi istilikkeçiriciliyinin temperatur asılılığı tədqiq edilmişdir (Şəkil 2, $\alpha_{\text{üm}}$ əyrisi). Müəyyən edilmişdir ki, istilikkeçiriciliyi bütün temperatur intervalında T^{-1} qanunu üzrə dəyişir. İstiliyin daşınma mexanizmini aydınlaşdırmaq məqsədilə, əsas pay sahibləri olan elektron və fonon istilikkeçiriciliklərinin (müvafiq olaraq α_{el} və α_{fonon}) Videman-Frans qanununa əsasən hesablanmasından məlum oldu ki, α_{el} -nin qiymətləri ölçülən $\alpha_{\text{üm}}$ -nin qiymətlərinə çox yaxındır. Odur ki, keçirici materiallarda (metallarda) olduğu kimi [6] $\alpha_{\text{üm}} \approx \alpha_{el}$ şərti qəbul ediləndir.

NƏTİCƏ

1. İlk dəfə olaraq Ni_3Sn_4 -Bi sisteminin Ni_3Sn_4 birləşməsi tərəfdən hal diaqramı qurulmuş, və göstərilmişdir ki, sistem kvazistabil təbiətə malikdir. Sistemdə fiziki-kimyəvi proseslərlə yanaşı homogen tərkiblər də aşkar edilmişdir.

2. İstilik-fiziki xassələrin tədqiqindən müəyyən edilmişdir ki, $(Ni_3Sn_4)_{0,99}Bi_{0,01}$ bərk məhlul tərkibi elektron cihazqayırmasında omik kontakt materialları kimi istifadə edilə bilər.

ƏDƏBİYYAT

1. Диаграммы состояния двойных металлических систем. Справочник в 3-х томах (под ред. Н.П. Лякишева). М., Машиностроение, 1996, 992 с.
2. Babanlı M.B., İyashlı T.M., Sadıqov F.M., Yusibov Y.Ə. Fiziki-kimyəvi analizin əsasları. Bakı, BDU-nun nəşriyyatı, 2002, 250 s.
3. Павлов Л.П. Методы измерения параметров полупроводниковых материалов. М., Высшая Школа, 1987, 239 с.
4. Кретьова М.А., Авилов Е.С., Земсков В.С. Введение в методику эксперимента, результаты и их обсуждение. М., Наука, 2004, 196 с.
5. Воробьева А.И., Уткина Е.А. Материалы электронной техники. Минск, БГУИП, 2007, 226 с.
6. Охотин А.С., Боровикова Р.П., Нечаева Т.В., Пушкарский А.С. Теплопроводность твердых тел. М., Энергоатомиздат, 1984, 320 с.

INSTRUCTIONS FOR AUTHORS

1. "The Baku Engineering University Journal-Physics" accepts original unpublished articles and reviews in the research field of the author.
2. Articles are accepted in English.
3. File format should be compatible with **Microsoft Word** and must be sent to the electronic mail (**journal@beu.edu.az**) of the Journal. The submitted article should follow the following format:
 - Article title, author's name and surname
 - The name of workplace
 - Mail address
 - Abstract and key words
4. The title of the article should be in each of the three languages of the abstract and should be centred on the page and in bold capitals before each summary.
5. **The abstract** should be written in **9 point** type size, between **100** and **150** words. The abstract should be written in the language of the text and in two more languages given above. The abstracts of the article written in each of the three languages should correspond to one another. The keywords should be written in two more languages besides the language of the article and should be at least three words.
6. **UDC** and **PACS** index should be used in the article.
7. The article must consist of the followings:
 - Introduction
 - Research method and research
 - Discussion of research method and its results
 - In case the reference is in Russian it must be given in the Latin alphabet with the original language shown in brackets.
8. **Figures, pictures, graphics and tables** must be of publishing quality and inside the text. Figures, pictures and graphics should be captioned underneath, tables should be captioned above.
9. **References** should be given in square brackets in the text and listed according to the order inside the text at the end of the article. In order to cite the same reference twice or more, the appropriate pages should be given while keeping the numerical order. For example: [7, p.15].

Information about each of the given references should be full, clear and accurate. The bibliographic description of the reference should be cited according to its type (monograph, textbook, scientific research paper and etc.) While citing to scientific research articles, materials of symposiums, conferences and other popular scientific events, the name of the article, lecture or paper should be given.

Samples:

- a) **Article:** Demukhamedova S.D., Aliyeva İ.N., Godjajev N.M.. *Spatial and electronic structure of monomerrik and dimeric conapeetes of carnosine üith zinc*, Journal of structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
 - b) **Book:** Christie ohn Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, p.386-398, 2002
 - c) **Conference paper:** Sadychov F.S., Aydın C., Ahmedov A.İ.. Appligation of Information – Commu-nication Technologies in Science and education. II International Conference."Higher Twist Effects In Photon- Proton Collisions", *Baki, 01-03 Noyabr, 2007, ss 384-391*
References should be in 9-point type size.
10. The margins sizes of the page: - Top 2.8 cm. bottom 2.8 cm. left 2.5 cm, right 2.5 cm. The article main text should be written in Palatino Linotype 11 point type size single-spaced. Paragraph spacing should be 6 point.
 11. The maximum number of pages for an article should not exceed 15 pages
 12. The decision to publish a given article is made through the following procedures:
 - The article is sent to at least to experts.
 - The article is sent back to the author to make amendments upon the recommendations of referees.
 - After author makes amendments upon the recommendations of referees the article can be sent for the publication by the Editorial Board of the journal.

YAZI VƏ NƏŞR QAYDALARI

1. "Journal of Baku Engineering University" Fizika- əvvəllər nəşr olunmamış orijinal əsərləri və müəllifin tədqiqat sahəsi üzrə yazılmış icmal məqalələri qəbul edir.
 2. Məqalələr İngilis dilində qəbul edilir.
 3. Yazılar **Microsoft Word** yazı proqramında, (**journal@beu.edu.az**) ünvanına göndərməlidir. Göndərilən məqalələrdə aşağıdakılara nəzərə alınmalıdır:
 - Məqalənin başlığı, müəllifin adı, soyadı,
 - İş yeri,
 - Elektron ünvanı,
 - Xülasə və açar sözlər.
 4. **Məqalədə başlıq hər xülasədən əvvəl** ortada, qara və böyük hərflə xülasələrin yazıldığı hər üç dildə olmalıdır.
 5. **Xülasə** 100-150 söz aralığında olmaqla, 9 punto yazı tipi böyüklüyündə, məqalənin yazıldığı dildə və bundan əlavə yuxarıda göstərilən iki dildə olmalıdır. Məqalənin hər üç dildə yazılmış xülasəsi bir-birinin eyni olmalıdır. Açar sözlər uyğun xülasələrin sonunda onun yazıldığı dildə verilməklə ən azı üç sözdən ibarət olmalıdır.
 6. Məqalədə UOT və PACS kodları göstərməlidir.
 7. Məqalə aşağıdakılardan ibarət olmalıdır:
 - Giriş,
 - Tədqiqat metodu
 - Tədqiqat işinin müzakirəsi və onun nəticələri,
 - İstinad ədəbiyyatı rus dilində olduğu halda orijinal dili mötəzə içərisində göstərməklə yalnız Latın əlifbası ilə verilməlidir.
 8. **Şəkil, rəsm, grafik və cədvəllər** çapda düzgün, aydın çıxacaq vəziyyətdə və mətn içərisində olmalıdır. Şəkil, rəsm və grafiklərin yazıları onların altında yazılmalıdır. Cədvəllərdə başlıq cədvəlün üstündə yazılmalıdır.
 9. **Mənbələr** mətn içərisində kvadrat mötərizə daxilində göstərməklə məqalənin sonunda mətn daxilindəki sıra ilə düzəlməlidir. Eyni mənbəyə iki və daha çox istinad edildikdə əvvəlki sıra sayı saxlanmaqla müvafiq səhifələr göstərməlidir. Məsələn: [7,səh.15].

Ədəbiyyat siyahısında verilən hər bir istinad haqqında məlumat tam və dəqiq olmalıdır. İstinad olunan mənbənin biblioqrafik təsviri onun növündən (monoqrafiya, dərslik, elmi məqalə və s.) asılı olaraq verilməlidir. Elmi məqalələrə, simpozium, konfrans, və digər nüfuzlu elmi tədbirlərin materiallarına və ya tezislərinə istinad edərkən məqalənin, məruzənin və ya tezisnin adı göstərməlidir.
- Nümunələr:**
- a) **Məqalə:** Demukhamedova S.D., Aliyeva İ.N., Godjayev N.M.. *Spatial and electronic structure of monomeric and dimeric complexes of carnosine with zinc*, Journal of structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
 - b) **Kitab:** Christie ohn Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, 2002
 - c) **Konfrans:** Sadychov F.S., Aydın C., Ahmedov A.İ.. Appligation of Information-Communication Technologies in Science and education. II International Conference. "Higher Twist Effects In Photon- Proton Collisions", Baki, 01-03 Noyabr, 2007, ss 384-391
- Mənbələr 9 punto yazı tipi böyüklüyündə olmalıdır.
10. **Səhifə ölçüləri:** üstədən 2.8 sm, altdan 2.8 sm, soldan 2.5 sm və sağdan 2.5 sm olmalıdır. Mətn 11 punto yazı tipi böyüklüyündə, **Palatino Linotype** yazı tipi ilə və tək simvol aralığında yazılmalıdır. Paraqraflar arasında 6 punto yazı tipi aralığında məsafə olmalıdır.
 11. Orijinal tədqiqat əsərlərinin tam mətni bir qayda olaraq 15 səhifədən artıq olmamalıdır.
 12. Məqalənin nəşrə təqdimi aşağıdakı qaydada aparılır:
 - Hər məqalə ən azı iki ekspertə göndərilir.
 - Ekspertlərin tövsiyələrini nəzərə almaq üçün məqalə müəllifə göndərilir.
 - Məqalə, ekspertlərin tənqidi qeydləri müəllif tərəfindən nəzərə alındıqdan sonra Jurnalın Redaksiya Heyəti tərəfindən çapa təqdim oluna bilər.

YAZIM KURALLARI

1. "Journal of Baku Engineering University-Physics" önceler yayımlanmamış orijinal çalışmaları ve yazarın kendi araştırma alanında yazılmış derleme makaleleri kabul etmektedir.
2. Makaleler İngilizce kabul edilir.
3. Makaleler Microsoft Word yazı programında, (**journal@beu.edu.az**) adresine gönderilmelidir. Gönderilen makalelerde şunlar dikkate alınmalıdır:
 - Makalenin başlığı, yazarın adı, soyadı,
 - İş yeri,
 - E-posta adresi,
 - Özet ve anahtar kelimeler.
4. **Özet** 100-150 kelime arasında olup 9 font büyüklüğünde, makalenin yazıldığı dilde ve yukarıda belirtilen iki dilde olmalıdır. Makalenin her üç dilde yazılmış özeti birbirinin aynı olmalıdır. Anahtar kelimeler uygun özeti sonunda onun yazıldığı dilde verilmekle en az üç sözcükten oluşmalıdır.
5. Makalede UOT ve PACS tipli kodlar gösterilmelidir.
6. Makale şunlardan oluşmalıdır:
 - Giriş,
 - Araştırma yöntemi
 - Araştırma
 - Tartışma ve sonuçlar,
 - İstinat Edebiyatı Rusça olduğu halde orijinal dili parantez içerisinde göstermekle yalnız Latin alfabesi ile verilmelidir.
7. **Şekil, Resim, Grafik ve Tablolar** baskıda düzgün çıkacak nitelikte ve metin içerisinde olmalıdır. Şekil, Resim ve grafiklerin yazıları onların alt kısmında yer almalıdır. Tablolarda ise başlık, tablonun üst kısmında bulunmalıdır.
8. **Kullanılan kaynaklar**, metin dâhilinde köşeli parantez içerisinde numaralandırılmalı, aynı sırayla metin sonunda gösterilmelidir. Aynı kaynaklara tekrar başvurulduğunda sıra muhafaza edilmelidir. Örneğin: [7,seh.15]. Referans verilen her bir kaynağın künyesi tam ve kesin olmalıdır. Referans gösterilen kaynağın türü de eserin türüne (monografi, derslik, ilmi makale vs.) uygun olarak verilmelidir. İlmî makalelere, sempozyum, ve konferanslara müracaat ederken makalenin, bildirinin veya bildiri özetlerinin adı da gösterilmelidir.

Örnekler:

- a) **Makale:** Demukhamedova S.D., Aliyeva İ.N., Godjajev N.M.. *Spatial and Electronic Structure of Monomeric and Dimeric Conapeetes of Carnosine Üith Zinc*, Journal of Structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
- b) **Kıtap:** Christie ohn Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, p.386-398, 2002
- c) **Kongre:** Sadychov F.S., Aydın C., Ahmedov A.İ. Appligation of Information-Communication Technologies in Science and education. II International Conference. "*Higher Twist Effects In Photon- Proton Collisions*", Baki, 01-03 Noyabr, 2007, ss 384-391

Kaynakların büyüklüğü 9 punto olmalıdır.

9. **Sayfa ölçüleri**; üst: 2.8 cm, alt: 2.8 cm, sol: 2.5 cm, sağ: 2.5 cm şeklinde olmalıdır. Metin 11 punto büyüklükte **Palatino Linotype** fontu ile ve tek aralıkta yazılmalıdır. Paragraflar arasında 6 puntoluk yazı mesafesinde olmalıdır.
10. Orijinal araştırma eserlerinin tam metni 15 sayfadan fazla olmamalıdır.
11. Makaleler dergi editör kurulunun kararı ile yayımlanır. Editörler makaleyi düzeltme için yazara geri gönderilebilir.
12. Makalenin yayına sunuşu aşağıdaki şekilde yapılı:
 - Her makale en az iki uzmana gönderilir.
 - Uzmanların tavsiyelerini dikkate almak için makale yazara gönderilir.
 - Makale, uzmanların eleştirel notları yazar tarafından dikkate alındıktan sonra Derginin Yayın Kurulu tarafından yayına sunulabilir.
13. Azerbaycan dışından gönderilen ve yayımlanacak olan makaleler için,(derginin kendilerine gönderilmesi zamani posta karşılığı) 30 ABD Doları veya karşılığı TL, T.C. Ziraat Bankası/Üsküdar-İstanbul 0403 0050 5917 No'lu hesaba yatırılmalı ve makbuzu üniversitemize fakslenmelidir.

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

1. «Journal of Baku Engineering University» - Физика публикует оригинальные, научные статьи из области исследования автора и ранее не опубликованные.
2. Статьи принимаются на английском языке.
3. Рукописи должны быть набраны согласно программы **Microsoft Word** и отправлены на электронный адрес (**journal@beu.edu.az**). Отправляемые статьи должны учитывать следующие правила:
 - Название статьи, имя и фамилия авторов
 - Место работы
 - Электронный адрес
 - Аннотация и ключевые слова
4. **Заглавие статьи** пишется для каждой аннотации заглавными буквами, жирными буквами и располагается по центру. Заглавие и аннотации должны быть представлены на трех языках.
5. **Аннотация**, написанная на языке представленной статьи, должна содержать 100-150 слов, набранных шрифтом 9 punto. Кроме того, представляются аннотации на двух других выше указанных языках, перевод которых соответствует содержанию оригинала. Ключевые слова должны быть представлены после каждой аннотации на его языке и содержать не менее 3-х слов.
6. В статье должны быть указаны коды UOT и PACS.
7. Представленные статьи должны содержать:
 - Введение
 - Метод исследования
 - Обсуждение результатов исследования и выводов.
 - Если ссылаются на работу на русском языке, тогда оригинальный язык указывается в скобках, а ссылка дается только на латинском алфавите.
8. **Рисунки, картинки, графики и таблицы** должны быть четко выполнены и размещены внутри статьи. Подписи к рисункам размещаются под рисунком, картинкой или графиком. Название таблицы пишется над таблицей.
9. **Ссылки** на источники даются в тексте цифрой в квадратных скобках и располагаются в конце статьи в порядке цитирования в тексте. Если на один и тот же источник ссылаются два и более раз, необходимо указать соответствующую страницу, сохраняя порядковый номер цитирования. Например: [7, стр.15]. Библиографическое описание ссылаемой литературы должно быть проведено с учетом типа источника (монография, учебник, научная статья и др.). При ссылке на научную статью, материалы симпозиума, конференции или других значимых научных мероприятий должны быть указаны название статьи, доклада или тезиса.

Например:

- a) **Статья:** Demukhamedova S.D., Aliyeva I.N., Godjajev N.M. *Spatial and electronic structure of monomeric and dimeric complexes of carnosine with zinc*, Journal of Structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
- b) **Книга:** Christie on Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, 2002
- c) **Конференция:** Sadychov F.S, Fydin C, Ahmedov A.I. Application of Information-Communication Nechnologies in Science and education. II International Conference. "*Higher Twist Effects In Photon-Proton Collision*", Baki,01-03 Noyabr, 2007, ss.384-391

Список цитированной литературы набирается шрифтом 9 punto.

10. **Размеры страницы:** сверху 2.8 см, снизу 2.8 см, слева 2.5 и справа 2.5. Текст печатается шрифтом **Palatino Linotype**, размер шрифта 11 punto, интервал-одинарный. Параграфы должны быть разделены расстоянием, соответствующим интервалу 6 punto.
11. Полный объем оригинальной статьи, как правило, не должен превышать 15 страниц.
12. Представление статьи к печати производится в ниже указанном порядке:
 - Каждая статья посылается не менее двум экспертам.
 - Статья посылается автору для учета замечаний экспертов.
 - Статья, после того, как автор учел замечания экспертов, редакционной коллегией журнала может быть рекомендована к печати.