УДК 541.13.544.65

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ СИСТЕМЫ ВИСМУТ-СЕЛЕН

С.П. Джавадова, В.А. Меджидзаде*, Г.С. Алиев, А.Ш. Алиев, Д.Б. Тагиев

Институт Катализа и Неорганической Химии им. М. Нагиева НАН Азербайджана, AZ 1143, проспект Г. Джавида 113, Баку, Азербайджан
*e-mail: vuska_80@mail.ru

Поступила в Редакцию 02.02.2021
Принята к публикации 29.04.2021

Данная работа посвящена изучению математической модели для оптимизации процесса получения тонких пленок Bi-Se электрохимическим методом. Исследование проводилось потенциодинамическим, потенциостатическим и гальваностатическим методами, в различных условиях на Pt и Ni электродах. Математические расчеты были выполнены в программном пакете с использованием специально разработанного для этого процесса программного обеспечения. С изучением влияний различных факторов (концентрации исходных компонентов, температуры, плотности тока и т.д.) были выбраны оптимальный режим электролиза и состав электролита для процесса совместного осаждения. По этим результатам для будущих целей были назначены критерии Снедоккора и Фишера и оценены коэффициенты регрессии. Полученное уравнение регрессии определяет содержание электролита и условия электролиза, которое позволяет осаждать сплав Bi-Se, содержащий в составе необходимое количество Bi.

Ключевые слова: *пленки Bi-Se, уравнение регрессии, критерии Снедоккора и Фишера, математическое моделирование.*
DOI: 10.32737/2221-8688-2021-1-47-55

Введение

С развитием нанотехнологии получение высококачественных тонких пленок и наноструктур является актуальной проблемой для исследователей [1-9]. Такие тонкие пленки и наноструктуры в зависимости от величины ширины запрещенной зоны могут использоваться при изготовлении магнитных носителей, электронных и оптических устройств, светодиодов, а также в тонкослойных солнечных батареях для производства и хранения энергии [10-11].

Халькогениды висмута являются одними из наиболее широко изученных слоистых материалов благодаря их хорошо известным термоэлектрическим свойствам [12], а также недавно обнаруженным свойствам топологических изоляторов [13]. Будучи важным халькогенидом n-типа, Bi_2Se_3 обладает многими важными характеристиками, такими как высокая электропроводность [14], заметные термоэлектрические свойства [15], фоточувствительность [16] и фотопроводимость [17]. Тонкие пленки на основе Bi_2Se_3 имеют большое технологическое значение из-за их потенциального применения в солнечных селективных, оптоэлектронных устройствах, термоэлектрических охладителях и декоративных покрытиях [18-19].

Получение таких тонких пленок электрохимическим способом является очень экономичным, потому что этот метод обладает множеством привлекательных особенностей по сравнению с другими методами. Здесь используется простая и недорогая аппаратура, осаждение тонких пленок можно осуществлять на большие поверхности, получать пленки в заданных толщинах и т.д. Как известно, для определения оптимального режима при получении тонких пленок изучается влияние основных факторов, как концентрация компонентов в электролите, плотность тока, температура электролита и др. на процесс электроосаждения. Изменение каждого из этих факторов влияет на процесс электрохимического осаждения, меняя состав конечного продукта в разных направлениях. Для уточнения необходимо проводить многочисленные эксперименты, меняя при этом один из факторов, влияющих на процесс электроосаждения, оставляя остальные факторы постоянными. Все это отнимает много времени, и возникают трудности при решении проблемы [20].

Поэтому, составление математической модели исследованного процесса на основании полученных результатов сокращает число проводимых экспериментов, помогает минимизировать количество реагентов и с этим, соответственно, сокращается время, затраченное на исследования [20].

Математическое моделирование является мощным инструментом для решения различных проблем, возникающих при оптимизации химических процессов и получения максимальной рентабельности. Построение математической модели процесса, выбирая наиболее оптимальные параметры и выражая их в виде математической функции, может помочь увеличить выход продукции и снизить его себестоимость. Следовательно, математическая модель должна не только точно описывать фактический процесс, но также быть простой и обеспечивать точность расчетов [21].

На основе исследования методами математической статистики результатов процесса можно легко определить влияние основных параметров (концентрации исходных компонентов, температуры, плотности тока) на его протекание и определить закономерность протекания реакции, а также оптимальный режим его проведения. Для подтверждения полученных экспериментальных результатов строится уравнение регрессии, вычисляется критерий значимости и адекватности [22-26]. Именно эта методика была применена при исследовании процесса осаждения тонких пленок Bi-Se.

Методика эксперимента

При составлении математической модели процесса электроосаждения Bi – Se использованы экспериментальные данные, полученные в результате проведенных исследований [18, 19]. Для подтверждения результатов эксперимента на основе полученных данных было составлено регрессионное уравнение, рассчитаны критерии значимости и адекватности [22-27].

Вычисления выполнены специально разработанным для этого процесса программным обеспечением. При планировании полного факторного эксперимента (ПФЭ) данного процесса реализуются все возможные комбинации факторов на всех выбранных для исследования уровнях. Необходимое количество опытов N при ПФЭ определяется по формуле: $N = 2^k$, где κ - число факторов. В данном процессе основными факторами, которые влияют на выход целевого компонента, являются X_1 - плотность тока, mA/sm^2; X_2 - концентрация $Bi(NO_3)_3 \times 5H_2O$ в электролите, mol/l; X_3 - температура электролита, °C. В качестве выходного параметра принято содержание висмута в катодных осадках (Y, масс %).

Результаты и их обсуждение

Эмпирическое уравнение множественной регрессии представим в виде [24-27]:

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_1X_1 + ... + b_mX_m + e,$$

здесь $b_0, b_1, ..., b_m$ - оценки теоретических значений $\beta_0, \beta_1, \beta_2, ..., \beta_m$ коэффициентов регрессии (эмпирические коэффициенты регрессии); e - оценка отклонения ε.

Для оценки параметров уравнения множественной регрессии применяют МНК. При выполнении МНК (метод наименьших квадратов) относительно ошибок ε_i, оценки b_0, b_1, ..., b_m параметров β_0, β_1, β_2, ..., β_m множественной линейной регрессии по МНК являются несмещенными, эффективными и состоятельными. Результаты экспериментов приведены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты проведенных экспериментов процесса электроосаждения Bi с Se.

Плотность тока, A/dm^2	**$Bi(NO_3)_3 \times 5H_2O$ mol/l**	**Температура °C**	**Bi, %**
X_1	***X_2***	***X_3***	***Y***
1.5	0.07	25	67.5
1.5	0.07	35	71.9
1.5	0.07	45	72.6
1.5	0.07	55	74.2
1.5	0.07	65	75.1
2.5	0.07	25	62.79
2.5	0.07	35	64.8
2.5	0.07	45	66.3
2.5	0.07	55	67.5
2.5	0.07	65	66.1
3.5	0.07	25	53.4
3.5	0.07	35	56.2
3.5	0.07	45	56.9
3.5	0.07	55	57.5
3.5	0.07	65	54.1
1.5	0.05	25	57.6
1.5	0.07	25	67.5
1.5	0.09	25	75.1
1.5	0.11	25	82.7
2.5	0.05	25	52.9
2.5	0.07	25	62.79
2.5	0.09	25	70.6
2.5	0.11	25	78.3
3.5	0.05	25	42.5
3.5	0.07	25	53.4
3.5	0.09	25	62.5
3.5	0.11	25	69.8

Определим вектор оценок коэффициентов регрессии. Согласно методу наименьших квадратов, вектор *s* получается из выражения: $s = (X^TX)^{-1}X^TY$.

Сперва находим обратную матрицу $(X^TX)^{-1}$

$$(X^T X)^{-1} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1.697 & -0.139 & -13.056 & -0.00944 \\ \hline -0.139 & 0.0556 & 0 & 0 \\ \hline -13.056 & 0 & 157.407 & 0.037 \\ \hline -0.00944 & 0 & 0.037 & 0.000185 \\ \hline \end{array}$$

Вектор оценок коэффициентов регрессии равен

$$Y(X) = \begin{pmatrix} 1.697 & -0.139 & -13.056 & -0.00944 \\ -0.139 & 0.0556 & 0 & 0 \\ -13.056 & 0 & 157.407 & 0.037 \\ -0.00944 & 0 & 0.037 & 0.000185 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1742.58 \\ 4218.55 \\ 132.317 \\ 63197.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 47.304 \\ -7.661 \\ 417.911 \\ 0.146 \end{pmatrix}$$

Тогда уравнение регрессии будет иметь вид:

$$Y = 47.3038-7.6611X_1 + 417.9111X_2 + 0.1462X_3$$

Также вычислили дисперсии и среднеквадратические отклонения.

Признаки *X* и *Y*	$D(x)=\frac{\sum x_i^2}{n}-\overline{x}^2$	$D(y)=\frac{\sum y_i^2}{n}-\overline{y}^2$	$s(x)=\sqrt{D(x)}$	$s(y)=\sqrt{D(y)}$
Для y и x_1	0.667	83.898	0.816	9.16
Для y и x_2	0.000247	83.898	0.0157	9.16
Для y и x_3	209.877	83.898	14.487	9.16
Для x_1 и x_2	0.000247	0.667	0.0157	0.816
Для x_1 и x_3	209.877	0.667	14.487	0.816
Для x_2 и x_3	209.877	0.000247	14.487	0.0157

Затем построили модель регрессии в стандартном масштабе и вычислили ее коэффициенты. Такая модель предполагает, что все значения исследуемых признаков переводятся в стандарты (стандартизованные значения) по формулам:

$$t_j=\frac{xj_i-\overline{xj}}{S(x_j)}$$

где x_{ji} - значение переменной x_{ji} в i-ом наблюдении.

$$t_y=\frac{y_i-\overline{xj}}{S(y)}$$

Для построения стандартизированной формы уравнении регрессии вычислим матрицу парных коэффициентов корреляции. Результаты вычислений приведены в таблице:

-	y	x_1	x_2	x_3
y	1	-0.6829	0.6668	0.07564
x_1	-0.6829	1	0	0
x_2	0.6668	0	1	-0.2169

x_3	0.07564	0	-0.2169	1

Таким образом, начало отсчета каждой стандартизованной переменной совмещается с ее средним значением, а в качестве единицы изменения принимается ее среднее квадратическое отклонение *S*. Если связь между переменными в естественном масштабе линейная, то изменение начала отсчета и единицы измерения этого свойства не нарушат, так что и стандартизованные переменные будут связаны линейным соотношением:

$$t_y = \sum\beta_j t_{xj}$$

Для оценки β-коэффициентов применим МНК. Для наших данных (берем из матрицы парных коэффициентов корреляции):

$$-0.683 = \beta_1 + 0\beta_2 + 0\beta_3$$
$$0.667 = 0\beta_1 + \beta_2 -0.217\beta_3$$
$$0.0756 = 0\beta_1 -0.217\beta_2 + \beta_3$$

Данную систему линейных уравнений решаем методом Гаусса [22]:

$$\beta_1 = -0.683;\ \beta_2 = 0.717;\ \beta_3 = 0.231;$$

Стандартизированная форма уравнения регрессии имеет вид:

$$t_y = -0.683x_1 + 0.717x_2 + 0.231x_3$$

Перейдем к статистическому анализу полученного уравнения регрессии: проверке значимости уравнения и его коэффициентов, исследованию абсолютных и относительных ошибок аппроксимации. Для несмещенной оценки дисперсии проделаем следующие вычисления: Несмещенная ошибка ε = Y - Y(x) = Y - X*s (абсолютная ошибка аппроксимации).

Средняя ошибка аппроксимации:

$$A = \frac{\sum|\epsilon:Y|}{n}\cdot 100\,\% = \frac{0.608}{27}\cdot 100\,\% = 2.25\,\%$$

Оценка дисперсии равна:

$$s_e^2=(Y-Y(X))^T(Y-Y(X))=86.288$$

Несмещенная оценка дисперсии равна:

$$s^2 = \frac{1}{n-m-1}\cdot s_e^2 = \frac{1}{27-3-1}\cdot 86.288 = 3.7517$$

Оценка среднеквадратичного отклонения (*стандартная ошибка для оценки Y*):

$$S = \sqrt{S^2} = \sqrt{3.7517} = 1.937$$

Стандартизированные частные коэффициенты регрессии - β-коэффициенты (β_j) показывают, на какую часть своего среднего квадратического отклонения S(y) изменится доля целевого компонента процесса *Y* с изменением соответствующего фактора x_i на величину своего среднего квадратического отклонения (S_{xj}) при неизменном влиянии прочих факторов (входящих в уравнение). По максимальному β_j можно судить, какой фактор сильнее влияет на выход *Y*.

Коэффициент β_i может также интерпретироваться как показатель прямого влияния *j*-ого фактора (x_i) на выход *Y*. Во множественной регрессии

j-ый фактор оказывает не только прямое, но и косвенное влияние на результат (т.е. влияние через другие факторы модели). Косвенное влияние измеряется величиной: $\sum\beta_i r_{xj,xi}$, где m - число факторов в модели. Полное влияние *j-ого* фактора на результат, равное сумме прямого и косвенного влияний, измеряет коэффициент линейной парной корреляции данного фактора и результата - $r_{xj,y}$.

Для данного процесса непосредственное влияние фактора X_1 на результат Y в уравнении регрессии измеряется β_1 и составляет -0.683; косвенное влияние данного фактора на результат определяется как: $r_{x1x2}\beta_2 = 0 * 0.717 = 0$.

Также провели проверки значимости параметров множественного уравнения регрессии. Число *ν = n - m - 1* называется числом степеней свободы. Считается, что при оценивании множественной линейной регрессии для обеспечения статистической надежности требуется, чтобы число наблюдений, по крайней мере, в 3 раза превосходило число оцениваемых параметров. $T_{табл}$ (n-m-1;α/2) = (23;0.005) = 3.104.

$$t_i = \frac{b_i}{S_{bi}}$$

$$t_0 = \frac{47.304}{2.523} = 18.746 > 3.104$$

Статистическая значимость коэффициента регрессии b_0 подтверждается.

$$t_1 = \frac{-7.661}{0.457} = 16.781 > 3.104$$

Статистическая значимость коэффициента регрессии b_1 подтверждается.

$$t_2 = \frac{417.911}{24.301} = 17.197 > 3.104$$

Статистическая значимость коэффициента регрессии b_2 подтверждается.

$$t_3 = \frac{0.146}{0.0264} = 5.545 > 3.104$$

Статистическая значимость коэффициента регрессии b_3 подтверждается.

Проверено общее качество уравнения множественной регрессии. Оценка значимости уравнения множественной регрессии осуществляется путем проверки гипотезы о равенстве нулю коэффициента детерминации, рассчитанного по данным генеральной совокупности: R^2 или $b_1 = b_2 = ... = b_m = 0$. Для ее проверки используют F-критерий Фишера. При этом вычисляют фактическое (наблюдаемое) значение F-критерия через коэффициент детерминации R^2, рассчитанный по данным конкретного наблюдения. По таблицам распределения Фишера-Снедоккора находят критическое значение F-критерия ($F_{кр}$). Для этого задаются уровнем значимости α (обычно его берут равным 0,05) и двумя числами степеней свободы k_1=m и k_2=n-m-1.

Критерий Фишера для данного процесса равен:

$$R^2 = 1 - \frac{s_e^2}{\sum(y_i - \overline{y})^2} = 1 - \frac{86.288}{2265.26} = 0.9619$$

Проверка этой гипотезы осуществляется с помощью F-статистики распределения Фишера. Если $F < F_{kp} = F_{\alpha\,;\,n-m-1}$, то нет оснований для отклонения гипотезы H_0.

$$F = \frac{R^2}{1-R^2}\cdot\frac{n-m-1}{m} = \frac{0.9619}{1-0.9619}\cdot\frac{27-3-1}{3} = 193.6$$

Табличное значение при степенях свободы $k_1 = 3$ и $k_2 = n\text{-}m\text{-}1 = 27 - 3 - 1 = 23$, $F_{kp}(3;23) = 4.76$. Поскольку фактическое значение $F > F_{kp}$, то коэффициент детерминации статистически значим и уравнение регрессии статистически надежно (т.е. коэффициенты b_i совместно значимы).

Выводы

В результате расчетов было получено уравнение множественной регрессии: $Y = 47.3038 - 7.6611X_1 + 417.9111X_2 + 0.1462X_3$. Интерпретацию параметров модели можно провести следующим образом: увеличение плотности тока приводит к уменьшению, а увеличение концентрации $Bi(NO_3)_3{\times}5H_2O$ и температуры - к увеличению Bi в составе тонкой пленки. По максимальному коэффициенту β_2=0.717 сделан вывод, что наибольшее влияние на результат Bi оказывает фактор концентрации $Bi(NO_3)_3{\times}5H_2O$ в электролите. Статистическая значимость уравнения проверена с помощью коэффициента детерминации и критерия Фишера. Установлено, что в исследуемой ситуации 96.19 % общей вариабельности Bi объясняется изменением факторов X_i. Установлено также, что параметры модели статистически значимы. Средняя ошибка аппроксимации составляет 2.25 %.

Литература

1. He W., Zhang H., Zhang Y., Liu M., Zhang X., Yang F. Electrodeposition and Characterization of CuTe and Cu_2Te Thin Films. *Journal of Nanomaterials*, 2015, Article ID 240525, 5 P. https://dx.doi.org/10.1155/2015/240525
2. Dergacheva M.B., Nurtazina A.E., Urazov K.A., Gudeleva N.N., Yaskevich V.I., Grigor'eva V.P. Electrodeposition of Copper Selenide onto Mo Electrode in Tartaric Acid Solution. *Russ. J. Appl. Chem.* 2018, vol. 91, no.5, p.778–784. doi.org/10.1134/S1070427218050087
3. Tao J., Hu X., Xue J., Wang Y., Weng G., Chen S., Zhu Z., Chu J. Investigation of electronic transport mechanisms in Sb_2Se_3 thin-film solar cells. *J. Solar Energy Materials and Solar Cells.* 2019, vol. 197, pp.1–6.
4. Huseynov G.M., Mammadova N.A., Imanov HA. Obtaining of nanosized compound Sb_2S_3 on the basis of tioacetamide and antimony (III) chloride. *Chemical Problems*, 2017, vol. 15, no. 3, pp. 329-334. https://doi.org/10.32737/2221-8688-2017-3-329-334
5. Demura S., Tanaka M., Yamashita A., Denholme S.J., Okazaki H., Fujioka M., Yamaguchi T., Takeya H., Iida K., Holzapfel B., Sakata H., Takano Y. Electrochemical deposition of FeSe on RABiTS tapes. *J. Phys. Soc.*, 2015, vol. 85, 015001. doi.org/10.7566/JPSJ.85.015001.
6. Eftekhar A. Molybdenum diselenide ($MoSe_2$) for energy storage, catalysis, and optoelectronics. *Appl. Mater. Today*, 2017, vol. 8, pp. 1-17. doi 10.1016/j.apmt.2017.01.006
7. Majidzade V.A. The effect of various factors on the composition of electrolytic thin films Sb-Se. *Chemical Problems.* 2018, vol. 16, no. 3, pp. 331-336. https://doi.org/10.32737/2221-8688-2018-3-331-336
8. Aliyev A.Sh., Majidzade V.A., Soltanova N.Sh., Tagiyev D.B., Fateev V.N. Some features of electrochemically deposited CdS nanowires. *Chemical Problems.* 2018, vol.

16, no 2, pp. 175-185. https://doi.org/10.32737/2221-8688-2018-2-178-185

9. Majidzade V.A., Mammadova S.P., Petkucheva E.S., Slavcheva E.P., Aliyev A.Sh., Tagiyev D.B. Co-electrodeposition of iron and sulfur in aqueous and non-aqueous electrolytes. *Bulgarian Chemical Communications*. 2020, vol. 52, special issue E, pp. 73-78
10. Fateev V.N., Alexeeva O.K., Korobtsev S.V., Seregina E.A., Fateeva T.V., Grigoriev A.S., Aliyev A.Sh. Problems of accumulation and storage of hydrogen. *Chemical Problems*. 2018, vol. 16, no. 4, pp. 453-483. https://doi.org/10.32737/2221-8688-2018-4-453-483
11. Kulova T.L., Nikolaev I.I., Fateev V.N., Aliyev A.Sh. Modern electrochemical systems of energy accumulation. *Chemical Problems*. 2018, vol. 16, no 1, pp. 9-34. https://doi.org/10.32737/2221-8688-2018-1-9-34
12. Nolas G.S., Sharp J., Goldsmid H.J. Thermoelectrics: Basic Principles and New Materials Developments. New York, Springer, 2001, 292 p.
13. Zhang H., Liu C.-X., Qi X.-L., Dai X., Fang Z., Zhang S.-C. Topological insulators in Bi_2Se_3, Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface. *Nat. Phys.* 2009, vol. 5, no. 6, pp. 438-442.
14. Osterhage H., Gooth J., Hamdou B., Gwozdz P., Zierold R., Nielsch K. Thermoelectric properties of topological insulator Bi_2Te_3, Sb_2Te_3, and Bi_2Se_3 thin film quantum wells. *Appl. Phys. Lett.* 2014, vol. 105, p. 123117.
15. Souza P.B., Tumelero M.A., Zangari G., Pasa A.A. Tuning Electrodeposition Conditions towards the Formation of Smooth Bi_2Se_3 Thin Films. *Journal of The Electrochemical Society*. 2017, vol. 164 (7), pp. D401-D405. https: //doi.org/10.1149/2.0531707jes
16. Jerng S.-K., Joo K., Kim Y., Yoon S.-M., Lee J.H., Kim M., Kim J.S., Yoon E., Chuna S.-H., Kim Y.S. Ordered growth of topological insulator Bi_2Se_3 thin films on dielectric amorphous SiO_2 by MBE. *Nanoscale*, 2013, vol. 5, p. 10618. https: //doi.org/10.1039/c3nr03032f
17. Meyer N., Geishendorf K., Walowski J., Thomas A., Münzenberg M. Photocurrent measurements in topological insulator Bi_2Se_3 nanowires. *Appl. Phys. Lett*. 2020, vol. 116, p. 172402. https: //doi.org/10.1063/1.5142837
18. Javadova S.P., Majidzade V.A., Aliyev A.Sh., Azizova A.N., Tagiyev D.B. Electrodeposition of Bi-Se thin films involving ethylene glycol based electrolytes. *Electrochemical Science and Engineering*. 2021, vol. 11(1), pp. 51-58.
19. Majidzade V.A., Javadova S.P., Aliyev A.Sh., Tagiyev D.B. Effect of major factors on the composition of thin Bi_2Se_3 films. *Russian Journal of Applied Chemistry*, 2021, vol. 94, Issue 1, pp. 38-42.
20. Jafarova S.F. Mathematical modeling for the electrochemical deposition process of molybdenum-sulfur system. *Processes of Petrochemistry and oil refining*. 2019, vol. 20, no. 2, pp. 138-144.
21. Majidzade V.A., Aliyev G.S., Aliyev A.Sh., Huseynova R.H., Mammadova Z.M. Mathematical modeling and optimization of the electrodeposition process of antimony-selenium system. *Azerbaijan Chemical Journal*, 2021, no. 1, pp. 30-36.
22. Самарский АА. Введение в численные методы. М.: Лань, 2005. 288 с.
23. Самарский АА, Михайлов А. П. Математическое моделирование. Идеи. Методы. Примеры. М.: Физматгиз, 1997, 320 с.
24. Быков В.И., Журавлев В.М. Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов. Красноярск: ИПЦ КГТУ, 2002, 298 с.
25. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. М.: Высшая школа, 1985, 327 с.
26. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. Л.: Химия, 1971.С.190.
27. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ, 3-е изд., Киев: 2016, 912 с.

BİSMUT–SELEN SİSTEMİNİN ELEKTROÇÖKMƏ PROSESİNİN RİYAZİ MODELLƏŞDİRİLMƏSİ

S.P. Cavadova, V.A. Məcidzadə, Q.S. Əliyev, A.Ş. Əliyev, D.B. Tagıyev

AMEA akad. M. Nagiyev adına Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutu
AZ 1143, H. Cavid pros. 113, Bakı, Azərbaycan
e-mail: vuska_80@mail.ru

Təqdim edilən iş elektrokimyəvi üsulla Bi–Se nazik təbəqələrinin alınması prosesinin riyazi modelinin və optimallaşdırılmasının öyrənilməsinə həsr edilmişdir. Tədqiqat işi potensiodinamik, potensiostatik və qalvanostatik üsullardan istifadə etməklə müxtəlif şəraitlərdə, Pt və Ni elektrodları səthində aparılmışdır. Riyazi hesablamalar xüsusi olaraq bu proses üçün işlənib hazırlanmış OptimME proqram paketində həyata keçirilmişdir. Müxtəlif faktorların (başlanğıc komponentlərin qatılığı, temperatur, cərəyan sıxlığı və s.) təsiri öyrənilməklə birgə çökmə prosesi üçün optimal elektroliz rejimi və elektrolit tərkibi seçilmişdir ki, bu nəticələrdən də istifadə etməklə, gələcək praktiki məqsədlər üçün prosesin Snedoker və Fişer meyarları təyin edilmiş, reqressiya əmsalları qiymətləndirilmişdir. Alınmış reqressiya tənliyi tərkibində lazım olan miqdarda Bi olan Bi–Se ərintisini almağa imkan verən elektrolitin tərkibini və elektroliz şəraitini müəyyən edir.
Açar sözlər: *Bi–Se təbəqələri, reqressiya tənliyi, Snedoker və Fişer meyarları, riyazi modelləşmə.*

MATHEMATICAL MODELING OF THE ELECTRODEPOSITION PROCESS OF BISMUTH-SELENIUM SYSTEM

S.P. Javadova, V.A. Majidzade, G.S. Aliyev, A.Sh. Aliyev, D.B. Tagiyev

M. Nagiyev Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry, NASA of Azerbaijan
AZ 1143, H. Javid ave. 113, Baku, Azerbaijan
e-mail: vuska_80@mail.ru

This work deals with study into mathematical model for optimization of the preparation of thin Bi–Se films by the electrochemical method. The study was conducted by means of potentiodynamic, potentiostatic and galvanostatic methods carried out under different conditions at Pt and Ni electrodes. Mathematical calculations were performed in the OptimME software package using specially developed software for this process. Study into effects of various factors (concentration of initial components, temperature, current density, etc.) made it possible to select optimal electrolysis mode and electrolyte composition for co-deposition process. Based on these results, Snedocor and Fisher criteria were assigned for future purposes, and regression coefficients were estimated. The obtained regression equation determines electrolyte content and electrolysis conditions which allow precipitating the Bi–Se alloy containing the required amount of Bi.
Keywords: *Bi–Se films, regression equation, Snedocor and Fisher criteria, mathematical modeling.*