



AZƏRBAYCAN ELM FONDU

Azərbaycan Elm Fondunun
2022-ci il üçün ƏSAS qrant müsabiqəsinin
(AEF-MCG-2022-1(42)) qalibi olmuş
layihənin yerinə yetirilməsi üzrə aralıq
(rüblük olaraq 5-ci mərhələ)

ELMİ-TEXNİKİ HESABAT

Layihənin adı: **Metal xalkogenidləri və pniktidləri əsasında yeni maqnit xassəli Dirak materiallarının axtarışı, dizaynı və tədqiqi**

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: **Babanlı Məhəmməd Baba oğlu**

Layihənin nömrəsi: **AEF-MCG-2022-1(42)-12/10/4-M-10**

Müqavilənin imzalanma tarixi: **30 mart 2023-cü il**

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: **24 ay**

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): **01 may 2023-cü il - 01 may 2025-ci il**

Layihənin V mərhələ üzrə (rüb) məbləği:

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

1 Layihənin həyata keçirilməsi üzrə cari rübdə yerinə yetirilmiş **elmi işlər**

(burada doldurulmalı)

Bu mərhələdə layihə üzrə tədqiqatların I - IV mərhələlərində tədqiq olunan sistemlərin faza diaqramlarının xüsusi kompüter proqramları vasitəsilə müxtəlif nəzəri yanaşmalarda, o cümlədən qeyri-səlis məntiq nəzəriyyəsi və requlyar məhlul modeli əsasında, termodinamik analizi, analitik modelləşdirilməsi və 3D-vizuallaşdırılması həyata keçirilmişdir.

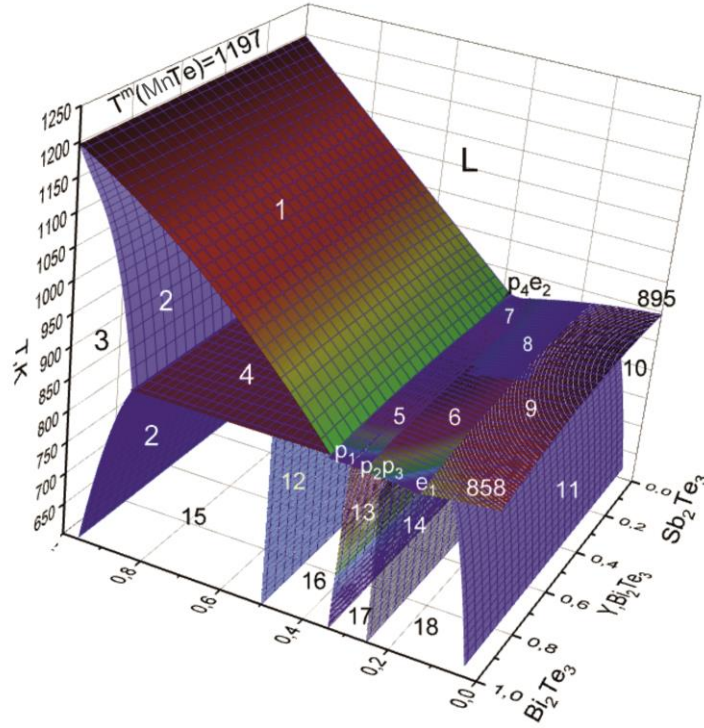
Faza diaqramlarının termodinamik modelləşdirilməsi üçün tarazlıqda olan fazaların komponentlərinin kimyəvi potensiallarının bərabərliyinə əsaslanan tənliklər həll edilmiş və məhdud təcrübi məlumatlardan istifadə etməklə heterogen tarazlıq sahələrinin sərhədləri üçün analitik ifadələr alınmışdır.

İlk növbədə tədqiq olunan üçlü $MnTe-Sb_2Te_3-Te$, $MnTe-Bi_2Te_3-Te$ və $Cd_3As_2-Zn_3As_2$ sistemlərinin, həmçinin kvaziüçlü $MnTe-GeTe-Sb_2Te_3$, $MnTe-Sb_2Te_3-Bi_2Te_3$, $MnTe-SnTe-Bi_2Te_3$ və qarşılıqlı $Mn, Bi || Se, Te$ sistemlərinin sərhəd kvazibinar hissələrinin faza diaqramlarının analitik modelləri tərtib olunmuşdur. Bununla yanaşı $MnBi_2Te_4$, $MnBi_4Te_7$, $MnBi_6Te_{10}$, $SnBi_2Te_4$, $SnBi_4Te_7$, $SnBi_6Te_{10}$, $MnSb_2Te_4$, $GeBi_2Te_4$, $GeSb_2Te_4$ və s. Laylı üçlü birləşmələri əsasında bərk məhlullarının əmələ gəlmə inteqral molyar Gibbs sərbəst enerjisi hesablanmışdır. Bunun üçün əvvəlki tədqiqatlarımızda uğurla sınaqdan keçirilmiş requlyar məhlullar modelindən istifadə edilmişdir.

Sonrakı mərhələdə isə yuxarıda göstərilən üçlü, kvaziüçlü və qarşılıqlı sistemlərin T-x-y diaqramlarının üçölçülü (3D) kompüter modelləri qurulmuşdur. Bu prosesin əsas prinsipi

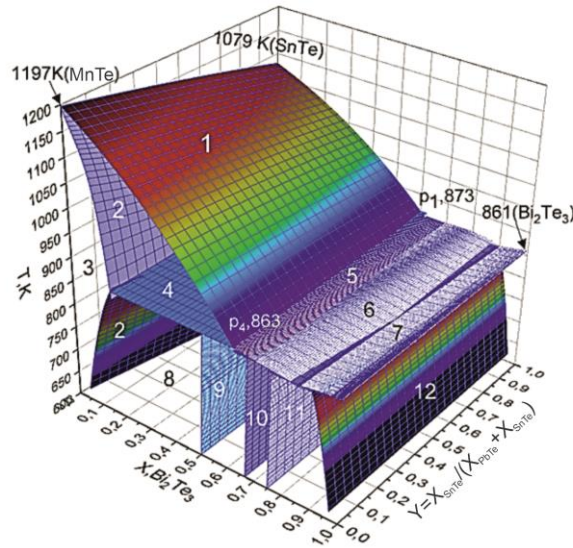
həmin sistemlərin likvidus və solidus səthlərinin və faza sahələrinin üçölçülü obyektlərinin qurulmasıdır. T-x-y diaqramlarının 3D kompüter modelləri tədqiq olunan sistemlərin həndəsi strukturunu daha əyani şəkildə və müxtəlif variantlarda təqdim etməyə imkan vermişdir. T-x və T-x-y diaqramlardan 3D kompüter modelinin qurulması bir neçə mərhələdə aparılmışdır: 1) mono- və nonvariant tarazlıqları əks etdirən həndəsi fiqurların alınması; 2) T-x-y diaqramının prototipinin 3D kompüter modelinin yaradılması; 3) Real sistem üçün T-x-y diaqramının 3D modelinin qurulması.

Aşağıda misal olaraq iki kvaziüçlü sistemin faza diaqramının 3D görüntüləri təqdim olunur:



Şəkil 1. MnTe-Bi₂Te₃- Sb₂Te₃ sisteminin hal diaqramının MnTe-Bi₂Te₃ sistemi tərəfdən 3D görüntüsü:

- 1- α (MnTe) əsasında bərk məhlulların likvidus səthi;
- 2- α (MnTe) əsasında bərk məhlulların solidus səthi;
- 3- α (MnTe) əsasında bərk məhlul sahəsi;
- 4- MnBi₂Te₄ peritektik birləşməsinin alındığı müstəvi;
- 5- MnBi₂Te₄ peritektik birləşməsinin likvidus səthi;
- 6- MnBi₄Te₇ və MnBi₆Te₁₀ peritektik birləşmələrinin likvidus səthi;
- 7- MnSb₂Te₄ peritektik birləşmələrinin likvidus səthi;
- 8- β -Bi₂Te₃ əsasında bərk məhlulların likvidus səthi;
- 9- β -Bi₂Te₃ və β -Sb₂Te₃ əsasında bərk məhlulların likvidus səthi;
- 10- β -Bi₂Te₃ və β -Sb₂Te₃ əsasında bərk məhlul sahəsi;
- 11- β -Bi₂Te₃ və β -Sb₂Te₃ əsasında bərk məhlulların solidus səthi;
- 12-14: MnBi₂Te₄, MnBi₄Te₇, MnBi₆Te₁₀ fazalarının soliduslarının peritektik çevrilmələr müstəvilərinə şaquli olan müstəviləri;
- 15- α (MnTe) əsasında bərk məhlullar+MnBi₂Te₄ heterogen sahəsi;
- 16- MnBi₂Te₄ + MnBi₄Te₇ heterogen sahəsi;
- 17- α - MnBi₄Te₇ + MnBi₆Te₁₁ heterogen sahəsi;
- 18- β -Bi₂Te₃ və β -Sb₂Te₃ əsasında bərk məhlullar+MnBi₆Te₁₁ heterogen sahəsi.



Şəkil 2. SnTe-MnTe-Bi₂Te₃ sisteminin hal diaqramının MnTe-Bi₂Te₃ sistemi tərəfdən 3D görüntüsü.

- 1- α (MnTe) və α (SnTe) əsasında bərk məhlulların likvidus səthi;
- 2- α (MnTe) və α (SnTe) əsasında bərk məhlulların solidus səthləi;
- 3- α (MnTe) və α (SnTe) əsasında bərk məhlul sahəsi;
- 4- MnBi₂Te₄ və SnBi₂Te₄ peritektik birləşmələrinin alındığı müstəvi;
- 5 - p₁p₂p₄p₅ sahəsi üzrə peritektik birləşmələrin kristallaşma səthi;
- 6 - p₂p₅p₄p₆e₁e₂ sahəsi üzrə peritektik birləşmələrin kristallaşma səthi
- 7- β -Bi₂Te₃ əsasında bərk məhlulların likvidus səthi;
- 8 - MnBi₂Te₄, SnBi₂Te₄ birləşmələri və α (MnTe), α (SnTe) əsasında bərk məhlulların heterogen qarışığı.
- 9-11: Mn(Sn)Bi₂Te₄, Mn(Sn)Bi₄Te₇, Mn(Sn)Bi₆Te₁₀ fazalarının soliduslarının peritektik çevrilmələr müstəvilərinə şaquli olan müstəviləri
- 12- β -Bi₂Te₃ əsasında bərk məhlulların solidus səthi.

2 Layihənin həyata keçirilməsi üzrə planda nəzərdə tutulmuş işlərin yerinə yetirilmə dərəcəsi (cari rüb üçün, faizlə qiymətləndirməli)

(burada doldurmalı)

100 %. İşlər tam həcmdə yerinə yetirilmişdir. Əlavə olaraq maqnit ölçmələri üçün nümunələr sintez olunmuşdur

3 Hesabat dövründə alınmış **elmi nəticələr**, onların yenilik dərəcəsi

(burada doldurmalı)

Layihənin tədqiqatlı obyektləri olan üçlü MnTe-Sb₂Te₃-Te, MnTe-Bi₂Te₃-Te və Cd₃As₂-Zn₃As₂ sistemlərinin, həmçinin kvaziüçlü MnTe-GeTe-Sb₂Te₃, MnTe-Sb₂Te₃-Bi₂Te₃, MnTe-SnTe-Bi₂Te₃ və qarşılıqlı Mn, Bi || Se, Te sistemlərinin sərhəd kvazibinar hissələrinin və tam T-x-y faza diaqramlarına aid təcrübə nəticələri kimi onların termodinamik analizi və 3D analitik modelləri tamamilə yenidir.

4 Layihənin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə olunan üsul və yanaşmalar

(burada doldurmalı)

Tədqiq olunan sistemlərin faza diaqramlarının termodinamik analizi, analitik modelləşdirilməsi və 3D-vizuallaşdırılması zamanı müxtəlif nəzəri yanaşmalardan, o cümlədən qeyri-səlis məntiq nəzəriyyəsinin və rəqulyar məhlul modelinin əsaslarından və riyazi

	aparatından istifadə olunmuşdur. Bütün proseslər xüsusi hazırlanmış kompüter proqramları vasitəsilə həyata keçirilmişdir.
5	<p>Layihə üzrə elmi nəşrlər (məqalələr, monoqrafiyalar, icmalar, konfrans materialları, tezislər) (dərc olunmuş, çapa qəbul olunmuş və çapa göndərilmişləri ayrılıqda qeyd etməklə) <i>(surətlərini əlavə etməli!)</i> <i>(burada doldurmalı)</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Imamaliyeva S.Z., Huseynova İ.F., Daraselia D., Japaridze D., Shengelaya A., M. B. Babanly M.B., Phase Relations in the $Tl_2Te-TlBiTe_2-TlGdTe_2$ Compositions Region of the $Tl-Bi-Gd-Te$ System and Magnetic Properties of the $TlBi_{1-x}Gd_xTe_2$ Solid Solution // J. Phase Equilib. Diffus., 2024., v.45. https://link.springer.com/article/10.1007/s11669-024-01096-w (https://doi.org/10.1007/s11669-024-01096-w) 2. Orujlu E.N. , Babanly D.M., Alakbarova T.M., Orujov N.I., Babanly M.B. Study of the solid-phase equilibria in the $GeTe-Bi_2Te_3-Te$ system and thermodynamic properties of $GeTe$-rich germanium bismuth tellurides // J.Chem. Thermodyn., 2024, v.196, p. 107323. https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0021961424000764?via%3DiHub (https://doi.org/10.1016/j.jct.2024.107323) 3. Seidzade A.E., Orujlu E.N., Babanly M.B. Experimental study of the phase equilibria in the $SnTe-Sb_2Te_3-Te$ system // Azerb.Chem.Journal, 2024, N2, p. 44-52. https://akj.az/uploads/documents/ASeyidzade.pdf (doi.org/10.32737/0005-2531-2024-2-44-52) 4. Orujlu E.N., Seyidzade A.E., Babanly M.B. Thermodynamic study of the $Mn(Sn)-Bi-Te$ systems / XXIV International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia (RCCT-2024), Ivanovo, 2024, c.344. https://rcct.isc-ras.ru/ (<i>Russ Chem Bull</i> 73, https://doi.org/10.1007/s11172-024-4225-7) 5. Mammadov F.M., Shukurova G.M., Imamaliyeva S.Z., Babanly M.B. Thermodynamic properties of the iron-gallium sulphides / XXIV International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia (RCCT-2024), Ivanovo, 2024, c.345. https://rcct.isc-ras.ru/ (<i>Russ Chem Bull</i> 73, https://doi.org/10.1007/s11172-024-4225-7)
6	<p>İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər <i>(burada doldurmalı)</i> Hesabat dövründə layihə üzrə ixtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər olmamışdır.</p>
7	<p>Layihə üzrə ezamiyyətlər <i>(burada doldurmalı)</i> Layihə rəhbəri prof. M.B.Babanlı 23-28 iyun 2024-cu il tarixlərində Rusiya Federasiyasının Moskva şəhərində Moskva Dövlət Universitetində kimya fakültəsinin qeyri-üzvi kimya kafedrasında (kafedra müdiri Rusiya Elmlər Akademiyasının müxbir üzvü, professor Andrey Vladimiroviç Şevelkov) ezamiyyətdə olmuşdur.</p>
8	<p>Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak <i>(burada doldurmalı)</i> Layihə üzrə elmi ekspedisiya nəzərdə tutulmamışdır.</p>
9	<p>Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak <i>(burada doldurmalı)</i> Layihə rəhbəri Moskva Dövlət Universitetinin qeyri-üzvi kimya kafedrasında təşkil olunmuş xüsusi seminarda iştirak və məruzə etmişdir.</p>
10	Layihə mövzusu üzrə elmi məruzələr (seminarlar, konfranslar, dəyirmi masalar və s. çıxışlar)

	<i>(burada doldurulmalı)</i> Layihə mövzusu üzrə Kataliz və qeyri-üzvi kimya İnstitutunda elmi seminar keçirilmiş və alınmış bir sıra nəticələr müzakirə edilmişdir.
11	Layihə üzrə əldə olunmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar <i>(burada doldurulmalı)</i> Hesabat dövründə layihədə nəzərdə tutulmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar hələlik alınmamışdır.
12	Yerli həmkarlarla əlaqələr <i>(burada doldurulmalı)</i> Layihə üzrə bəzi tədqiqatlar Bakı və Gəncə Dövlət Universitetlərinin, Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universitetinin əməkdaşlarının iştirakı ilə aparılmışdır.
13	Xarici həmkarlarla əlaqələr <i>(burada doldurulmalı)</i> Layihə üzrə tədqiqatlar İspaniya, Rusiya və Gürcüstandan olan həmkarlarımızla sıx əlaqələr şəraitində yerinə yetirilir.
14	Layihə mövzusu üzrə kadr hazırlığı <i>(burada doldurulmalı)</i> Layihə mövzusu üzrə tədqiqatlara Kataliz və qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun və Bakı Dövlət Universitetinin magistrant və doktorantları cəlb olunmuşlar, onlar elmi seminarlarda və dəyirmi masalarda iştirak edirlər.
15	Sərgilərdə iştirak <i>(burada doldurulmalı)</i> Sərgilərdə iştirak edilməyib.
16	Təcrübəartırmada iştirak və təcrübə mübadiləsi <i>(burada doldurulmalı)</i> Layihənin yerinə yetirilməsi gedişində xarici və yerli həmkarlarla mütəmadi təcrübə mübadiləsi aparılır.
17	Layihə mövzusu ilə bağlı elmi-kütləvi nəşrlər, kütləvi informasiya vasitələrində çıxışlar, yeni yaradılmış internet səhifələri və s. <i>(burada doldurulmalı)</i> Layihə mövzusu ilə bağlı elmi-kütləvi nəşrlər, kütləvi informasiya vasitələrində çıxışlar, yeni yaradılmış internet səhifələri və s. yoxdur.

Layihə rəhbərinin imzası _____ Babanlı Məhəmməd Baba oğlu

Tarix _____

QEYD: bütün hallarda uyğun olan bəndlər doldurulmalıdır.