



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 6-cı 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 VI mərhələ üzrə (rüb) məbləği:

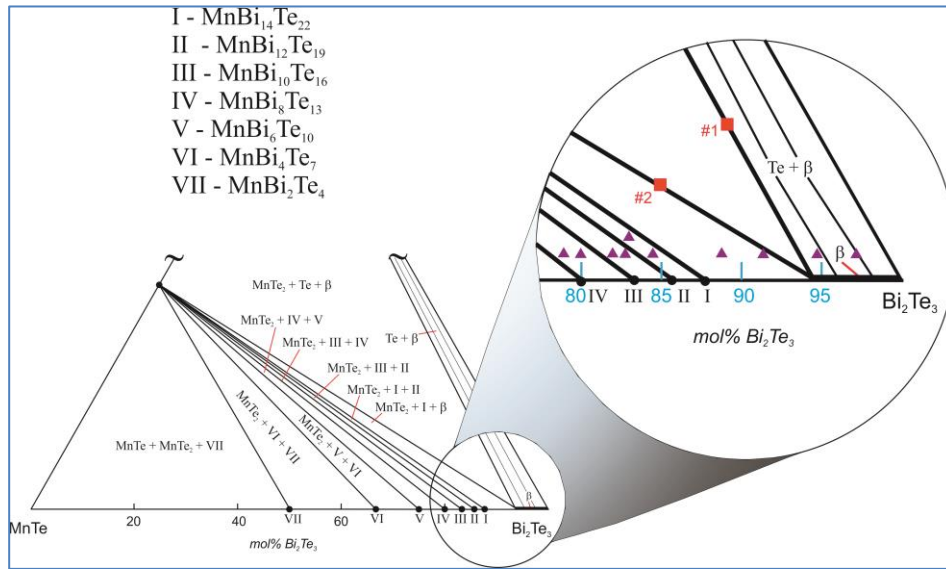
Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

- Layihənin həyata keçirilməsi üzrə cari rübdə yerinə yetirilmiş **elmi işlər**
Bu mərhələdə (avqust-oktyabr, 2024) əvvəlki mərhələlərdə faza tarazlıqlarını öyrəndiyimiz $MnTe-Sb_2Te_3-Te$, $MnTe-Bi_2Te_3-Te$, $Cd_3As_2-Zn_3As_2$ və $Cd_3Sb_2-Zn_3Sb_2$ sistemlərinin EHQ və DSK üsulları ilə termodinamik tədqiqi həyata keçirilmişdir. Tədqiq olunan sistemlərin faza diaqramlarının müxtəlif faza sahələrində
(-) $MnTe$ (bərk) | maye elektrolit + Mn^{2+} | $[Mn-Sb(Bi)-Te]$ (bərk) (+) (1)
və
(-) Cd (bərk) | maye elektrolit + Cd^{2+} | $[Cd-Zn-As(Sb)]$ (bərk) (+) (2)
tipli qatılıq dövrlərinin elektrik hərəkət qüvvələri 300-430 K temperatur intervalında ölçülmüşdür.
EHQ ölçmələri Keithley 2100 6 1/2 Digital Multimeterdən istifadə edərək həyata keçirilmişdir. İlk EHQ-nin tarazlıq qiymətləri qatılıq dövrəsinin ~360 K-də 20-40 saat saxlanmasıdan sonra qeydə alınmışdır. Növbəti ölçmələr müəyyən temperaturu təyin etdikdən sonra hər 3-4 saatdan bir əldə edilmişdir. EHQ qiymətləri 0,5 mV-dən az dəyişdikdə

sistemin tarazlıq vəziyyətinə çatdığı qəbul edilmişdir. Tərtib olunmuş qatılıq dövrlərinin dönərliyinə ölçmələr zamanı elektrodların kütlələrinin və faza tərkibinin sabit saxlanması ilə nəzarət olunmuşdur.

EHQ ölçmələrinin nəticələri əsasında həmin sistemlərin hal diaqramlarında faza sahələrinin sərhədlərinin dəqiqləşdirilmiş və aralıq fazaların fundamental termodinamik funksiyaları (parsial və inteqral əmələgəlmə termodinamik funksiyaları, faza çevrilmələrinin termodinamik funksiyaları) təyin edilmişdir. Aşağıda nümunə olaraq manqan-bismut telluridlərinin termodinamik tədqiqinin nəticələri verilir.

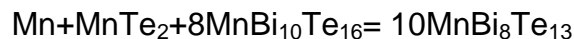
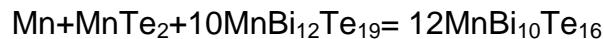
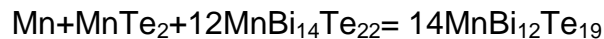
Sistemin faza diaqramı üzərində bəzi faza sahələri (**Şəkil**) üçün EHQ-nin temperaturdan asılılıq tənlikləri tərtib olunmuşdur.



Şəkil. MnTe-Bi₂Te₃-Te sisteminin 300 K-də bərkfaza tarazlıqları diaqramı. Üçbucaqlar EHQ üsulu ilə, kvadratlar isə XRD analizi ilə öyrənilmiş ərintiləri göstərir.

Həmin tənliklər əsasında müvafiq termodinamik ifadələrdən istifadə etməklə xəlitələrdə MnTe-in parsial termodinamik funksiyaları hesablanmışdır. Alınmış kəmiyyətləri MnTe və MnTe₂ birləşmələrinin termodinamik funksiyaları ilə kombinə etməklə xəlitələrdə manqanın parsial termodinamik funksiyaları hesablanmışdır.

Bu parsial molyar kəmiyyətlər üçün cavabdeh olan potensial əmələgətirici reaksiyalar faza diaqramı əsasında (**Şəkil**) təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, üçlü birləşmələr üçün reaksiya tənlikləri aşağıdakı kimidir:



Bu reaksiyalardan görünür ki, MnBi₁₄Te₂₂, MnBi₁₂Te₁₉, MnBi₁₀Te₁₆, və MnBi₈Te₁₃ birləşmələrinin standart inteqral termodinamik funksiyaları aşağıdakı ifadələr əsasında

hesablana bilər:

$$3.1667\Delta Z_{\text{MnBi}_{14}\text{Te}_{22}}^0 = \Delta \bar{Z}_{\text{Mn}} + \Delta Z_{\text{MnTe}_2}^0 + 23.3333\Delta Z_{\text{Mn}_{0.05}\text{Bi}_{1.9}\text{Te}_{2.9}}^0$$

$$7\Delta Z_{\text{MnBi}_{12}\text{Te}_{19}}^0 = 0.5\Delta \bar{Z}_{\text{Mn}} + 0.5\Delta Z_{\text{MnTe}_2}^0 + 6\Delta Z_{\text{MnBi}_{14}\text{Te}_{22}}^0$$

$$6\Delta Z_{\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}}^0 = 0.5\Delta \bar{Z}_{\text{Mn}} + 0.5\Delta Z_{\text{MnTe}_2}^0 + 5\Delta Z_{\text{MnBi}_{12}\text{Te}_{19}}^0$$

$$5\Delta Z_{\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}}^0 = 0.5\Delta \bar{Z}_{\text{Mn}} + 0.5\Delta Z_{\text{MnTe}_2}^0 + 4\Delta Z_{\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}}^0$$

Hesablamaların nəticələri Cədvəldə verilir.

Cədvəl.

№	Faza	$-\Delta_f G^\circ(298 \text{ K})$	$-\Delta_f H^\circ(298 \text{ K})$	$\Delta_f S^\circ(298 \text{ K})$	$S^\circ(298 \text{ K})$
		$\text{kC}\cdot\text{mol}^{-1}$		$\text{C}/(\text{K}\cdot\text{mol})$	
1	MnTe ₂ [ədəb.]	128.2 ± 0.1	124.7 ± 0.3	11.9 ± 0.8	142.9 ± 1.4
2	Bi ₂ Te ₃ [ədəb.]	76.9 ± 0.2	79.2 ± 0.5	7.7 ± 1.3	254.2 ± 3.0
3	β (Mn _{0.05} (Bi _{1.9} Te _{2.9}))	80.9 ± 0.2	82.6 ± 0.6	-5.7 ± 2.6	247.2 ± 3.0
4	MnBi ₁₄ Te ₂₂	677.1 ± 1.6	686.1 ± 4.7	-30.2 ± 20.0	1885 ± 24
5	MnBi ₁₂ Te ₁₉	598.6 ± 1.4	605.5 ± 4.2	-23.1 ± 16.4	1630 ± 21
6	MnBi ₁₀ Te ₁₆	520.0 ± 1.2	524.8 ± 3.6	-16.1 ± 13.9	1375 ± 18
7	MnBi ₈ Te ₁₃	441.2 ± 1.0	444.1 ± 3.0	-10.7 ± 11.4	1120 ± 15

Hesablamalarda EHQ ölçmələrindən alınmış nəticələrlə yanaşı, potensial əmələgətirici reaksiyalarda iştirak edən MnTe₂ və Bi₂Te₃ birləşmələrinin standart inteqral termodinamik funksiyalarına aid ədəbiyyat məlumatlarından da (Cədvəl) istifadə olunmuşdur.

Digər tədqiq olunan sistemlər üçün də oxşar qaydada müvafiq termodinamik funksiyalar hesablanmışdır.

Beləliklə, hesabat dövründə MnTe-Sb₂Te₃-Te, MnTe-Bi₂Te₃-Te, Cd₃As₂-Zn₃As₂ və Cd₃Sb₂-Zn₃Sb₂ sistemlərinin EHQ və DSK üsulları ilə termodinamik tədqiqi həyata keçirilmişdir. 300 K-də həmin sistemlərdə bərk faza tarazlıqları xarakteri müəyyən edilmiş və EHQ-nin ölçüldüyü temperatur diapazonu üçün temperaturdan asılılıq tənlikləri alınmışdır. Həmin sistemlərdə əmələgələn birləşmələrinin termodinamik funksiyalarının qarşılıqlı tənzimlənmiş qiymətləri topluları əldə edilmişdir. Bunun üçün əvvəlcə həmin sistemlərdə manqan telluridin parsial molyar Gibbs sərbəst enerjisi, entalpiyası və entropiyası hesablanmışdır. Bu funksiyaları MnTe-də manqanın qismən molyar funksiyaları ilə kombine edərək ərintilərdə manqanın müvafiq parsial funksiyaları müəyyən edilmişdir. Tədqiq edilən sistemlərdə əmələ gələn üçlü birləşmələrin əmələgəlmə standart termodinamik funksiyaları və standart entropiyaları müəyyən edilmiş potensial əmələgətirici reaksiyaların tənliklərindən istifadə etməklə, Bi₂Te₃ əsasında bərk məhlulların standart inteqral termodinamik funksiyalarının qiymətləri isə Gibbs-Duhem tənliyinin qrafik inteqrallanması ilə hesablanmışdır. Qeyd etmək lazımdır ki, bizim tədqiqatlar nəticəsində alınmış termodinamik funksiyalar toplusu maqnetik topoloji izolyatorlara aid ilk eksperimental termodinamik məlumatlardır.

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.
3	Hesabat dövründə alınmış elmi nəticələr , onların yenilik dərəcəsi (burada doldurmalı) Hesabat dövründə tədqiq olunmuş sistemlərin 3-lü birləşmələrinin təyin olunmuş termodinamik funksiyaları yenidir və bu fazaların sintezinin və kristallarının yetişdirilməsinin elmi əsasını təşkil edir.
4	Layihənin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə olunan üsul və yanaşmalar (burada doldurmalı) Termodinamik tədqiqatlar kimyəvi termodinamikanın ən dəqiq təcrübi üsulları olan EHQ və DSK üsulları ilə aparılmışdır. EHQ ölçmələri üçün 1014 Ohm giriş müqaviməti olan və $\pm 0,1$ mV dəqiqliyə malik Keithley 2100 6 ½ rəqəmsal multimetrdən istifadə edilmişdir. Temperaturu ölçmək üçün xromel-alumel termocüt və civə termometrindən istifadə edilmişdir. EHQ-nin temperatur asılılığının ən kiçik kvadratlar üsulu ilə Microsoft Exel kompüter programının köməklili ilə işlənməsinə Alınmış nəticələrin analizi üçün kimyəvi termodinamikanın riyazi aparatından və müasir yanaşmalarından istifadə olunmuşdur.
5	Layihə üzrə elmi nəşrlər (məqalələr, monoqrafiyalar, icmallar, konfrans materialları, tezislər) (dərç olunmuş, çapa qəbul olunmuş və çapa göndərilmişləri ayrılıqda qeyd etməklə) (surətlərini əlavə etməli!) (burada doldurmalı) 1. Mashadiyeva L.F., Babanly D.M., Hasanova Z.T., Yusibov Yu.A., Babanly M.B. Phase Relations in the Cu-As-S System and Thermodynamic Properties of Copper-arsenic Sulfides // J.Phase Equilib. Diff., 2024, v.45, p.567-582. (Web of Science) https://link.springer.com/article/10.1007/s11669-024-01115-w (https://doi.org/10.1007/s11669-024-01115-w) 2. Orujlu E.N., Alakbarova T.M. & Babanly M.B. GeTe–Bi ₂ Te ₃ –Te System. <i>Russ. J. Inorg. Chem.</i> (2024). (Web of Science) https://link.springer.com/article/10.1134/S003602362460151X (https://doi.org/10.1134/S003602362460151X) 3. Aghazade A.I., Babanly D.M., Zeynalova G.S., Qasymov V.A., S.Z.Imamaliyeva. Phase relations in the Bi ₂ –Bi ₂ Se ₃ –Bi ₂ Te ₃ system and characterization of solid solutions // <i>Azerb.Chem.Journal</i> , 2024, N1, p. 76-88. (Scopus) https://akj.az/uploads/DMBabanly.pdf (https://doi.org/10.32737/0005-2531-2024-76-88)
6	İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər (burada doldurmalı) Hesabat dövründə layihə üzrə ixtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər olmamışdır.
7	Layihə üzrə ezamiyyətlər (burada doldurmalı) Layihə rəhbəri prof. M.B.Babanlı 21-25 oktyabr 2024-cü il tarixində Gürcüstanın Tbilisi şəhərində İvan Cavaxişvili ad. Tbilisi Dövlət Universitetində ezamiyyətdə olmuşdur.
8	Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak (burada doldurmalı) Layihə üzrə elmi ekspedisiya nəzərdə tutulmamışdır.
9	Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak (burada doldurmalı) İştirak edilməmişdir.
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.