



AZƏRBAYCAN ELM FONDU

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

1 İLLİK 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 1 il üzrə (rüb) məbləği:

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

1	<p>Layihənin həyata keçirilməsi üzrə 1 il ərzində yerinə yetirilmiş elmi işlər (burada doldurmalı)</p> <p>Hesabat dövründə (layihə üzrə 1-12 aylar) maqnetik topoloji izolyator (MTİ) xassəli yeni fazaların axtarışı məqsədilə üçlü Mn-Sb-Te, Mn-Bi-Te, kvaziüçlü MnTe-GeTe-Sb₂Te₃, MnTe-Sb₂Te₃-Bi₂Te₃ və qarşılıqlı Mn,Bi//Se,Te sistemlərində müxtəlif tərkibli birləşmə və xəlitələr sintez olunmuş və termiki emaldan keçirilmişlər. İlk mərhələdə həmçinin tədqiqat obyektlərinə və oxşar sistemlərə aid yeni ədəbiyyat məlumatları toplanmış və araşdırılmışdır.</p> <p>Tədqiq edilən üçlü MnTe-Sb₂Te₃-Te, MnTe-Bi₂Te₃-Te və Cd₃As₂-Zn₃As₂ sistemlərində, həmçinin kvaziüçlü MnTe-GeTe-Sb₂Te₃, MnTe-Sb₂Te₃-Bi₂Te₃ və qarşılıqlı Mn,Bi//Se,Te sistemlərində faza tarazlıqları öyrənilmiş, onların faza diaqramlarının bir sıra politermik və izotermik kəsikləri, həmçinin likvidus səthlərinin proyeksiyaları qurulmuşdur. İlk iki üçlü sistemdə mMnTe•nB^V₂Te₃ (B^V - Sb, Bi) homoloji sırasına aid birləşmələr seriyası, Cd₃As₂-Zn₃As₂ sistemində isə fasiləsiz Cd_{3-x}Zn_xAs₂ bərk məhlul sırası aşkar olunmuşdur. Alınmış yeni fazalar DTA, RFA və SEM üsulları ilə xarakterizə edilmişlər.</p> <p>Cədvəl 1-də sintez edilmiş birləşmələrdən ikisinin (MnSb₂Te₄, MnSb₄Te₇) kristalloqrafik göstəriciləri verilir.</p>
----------	--

Cədvəl 1. MnSb₂Te₄ və MnSb₄Te₇ birləşmələrinin kristalloqrafik göstəriciləri.

Birləşmə	MnSb ₂ Te ₄	MnSb ₄ Te ₇
Fəza qrupu	<i>R-3m</i> (no. 166)	<i>P-3m1</i> (no. 164)
Z	3	1
Temperatur (K)	293	293
Qəfəs parametrləri: a (Å)	4.2445(2)	4.2513(3)
c (Å)	40.862(3)	23.761(4)
Elem.qəfəs həcmi (Å ³)	637.534	371.9108
RBreqq%	2.67	1.35
Süa	CuKα ₁	CuKα ₁

DTA və RFA üsulları ilə MnTe-Sb₂Te₃ sisteminin faza diaqramı qurulmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, sistem kvazibinardır və iki üçlü birləşməyə malikdir. MnSb₂Te₄ və MnSb₄Te₇ birləşmələrinin hər ikisi peritektik reaksiya üzrə parçalanmaqla əriyirlər. Peritektika temperaturları, müvafiq olaraq, 647 və 628 K-dir. MnSb₄Te₇ birləşməsi Sb₂Te₃ əsasında bərk məhlullarla evtektik tarazlıqdadır. Evtektik qarışıq 614 K temperaturda əriyir. Faza diaqramından həmçinin görünür ki, hər iki üçlü birləşmə əsasında məhdud həllolma sahəsi mövcuddur. İlk birləşmələr əsasında da məhdud həllolma sahələri əmələ gəlir. MnTe birləşməsinin müxtəlif modifikasiyaları əsasında bərk məhlulların əmələgəlməsi onun polimorf çevrilmə temperaturlarını azaldır və 1035, 977 və 883 K-də metatektik tarazlıqlar yaranır.

Hesabat dövründə həmçinin, MnTe-Sb₂Te₃-Te sistemində bərkfaza tarazlıqları xarakterli müəyyən edilmiş və sistemin bərkfaza tarazlıqları diaqramı qurulmuşdur. Qurulmuş diaqramdan görünür ki, MnTe₂ birləşməsi və sistemdə əmələgələn hər iki üçlü birləşmə solidusdan aşağıda Sb₂Te₃ əsasında bərk məhlullarla konnod əlaqəsindədir. Bu məlumatlar növbəti mərhələlərdə üçlü birləşmələrin EQ üsulu ilə termodinamik tədqiqində istifadə ediləcəkdir.

MnTe-GeTe-Sb₂Te₃ kvaziüçlü sisteminin tədqiqi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, MnSb₂Te₄ və MnSb₄Te₇ birləşmələri ilə onların germanium analogları arasında fasiləsiz əvəzlənmə bərk məhlulları əmələ gəlir. Həmin bərk məhlulların seçmə nümunələri sintez və identifikasiya olunmuşlar.

Hesabat dövründə, həmçinin, tərkibi və xassələri tənzimləyə bilən yeni maqnetik topoloji izolyator (MTİ) fazalarının axtarışı məqsədilə MnTe-Sb₂Te₃-Bi₂Te₃ kvaziüçlü və Mn,Bi//Se,Te qarşılıqlı sistemlərində faza tarazlıqları öyrənilmişdir. Tədqiqatlar aparmaq üçün həmin sistemlərin müxtəlif tərkibli birləşmə və xəlitələri sintez olunmuş və termiki emaldan keçirilmişlər.

Tədqiq edilən sistemlərin 300 K-də bərkfaza tarazlıqları diaqramları həmçinin həcmi T-x-y diaqramlarının bir sıra politermik kəsikləri qurulmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, MnTe-Sb₂Te₃-Bi₂Te₃ sistemində MnBi₂Te₄ və MnBi₄Te₇ birləşmələri əsasında Bi↔Sb əvəzləməli fasiləsiz bərk məhlul sıraları mövcuddur.

RFA üsulu ilə müəyyən edilmişdir, ki başlanğıc birləşmələr də daxil olmaqla bütün nümunələr keyfiyyətə eyni difraksiya mənzərəsinə malikdirlər. Bu, sistemdə fasiləsiz bərk

məhlullar əmələgəlməsini sübut edir. MnSb_2Te_4 - MnBi_2Te_4 kəsiyi üzrə bəzi nümunələrin toz difraktoqramları əsasında birləşmə və bərk məhlulların kristal qəfəs parametrləri hesablanmışdır (**Cədvəl 2**).

MnTe - Sb_2Te_3 - Bi_2Te_3 sistemində $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ və $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ birləşmələri əsasında geniş bərk məhlul sahələri aşkar olunmuşdur. Aldığımız ilkin nəticələr göstərir ki, homoloji sıranın bismutla daha zəngin birləşmələrində də bismut atomlarının müəyyən hissəsi stibiumla əvəz olunur. Lakin onların homogenlik sahələri dəqiq təyin edilməmişdir.

Cədvəl 2. MnSb_2Te_4 - MnBi_2Te_4 kəsiyi üzrə birləşmə və bərk məhlulların kristal qəfəs parametrləri

Composition, mol%	Crystal system	Space group	Lattice constants, Å	
			<i>a</i>	<i>c</i>
MnSb_2Te_4	Trigonal	<i>R-3m</i>	4.2445(2)	40.862(3)
20 mol% MnBi_2Te_4	Trigonal	<i>R-3m</i>	4.2587(6)	40.878(6)
40 mol% MnBi_2Te_4	Trigonal	<i>R-3m</i>	4.2738(7)	40.885(2)
60 mol% MnBi_2Te_4	Trigonal	<i>R-3m</i>	4.2927(2)	40.898(2)
80 mol% MnBi_2Te_4	Trigonal	<i>R-3m</i>	4.3087(1)	40.910(7)
MnBi_2Te_4	Trigonal	<i>R-3m</i>	4.3304(4)	40.919(4)

Fasiləsiz əvəz olunma bərk məhlulları əmələ gətirən MnSb_2Te_4 - MnBi_2Te_4 və MnSb_4Te_7 - MnBi_4Te_7 kəsiklərin faza diaqramları verilir. Göründüyü kimi hər iki politermik kəsik qeyri-kvazibinardır və tərkibcə onların T-x müstəvilərindən kənarında olan fazaların kristallaşması ilə xarakterizə olunur. Lakin, mürəkkəb kristallaşma prosesləri bircinsli γ və δ fazaların əmələgəlməsi ilə yekunlaşır.

$\text{Mn, Bi} // \text{Se, Te}$ qarşılıqlı sistemində isə tellurid birləşmələri əsasında geniş $\text{Te} \leftrightarrow \text{Se}$ əvəzləməli bərk məhlul sahələri aşkar edilmişdir. Hər iki sistemdə aşkar olunmuş yeni bərk məhlul nümunələri sintez və identifikasiya olunmuşlar.

Alınmış bir sıra birləşmə və bərk məhlul nümunələri növbəti mərhələdə maqnit xassələrinin tədqiqi üçün Tbilisi Dövlət Universitetinə təqdim edilmişdir.

Layihə üzrə tədqiqatların 4-cü mərhələsində (9-12 aylar) Cd_3As_2 - Zn_3As_2 sistemi fiziki-kimyəvi analiz üsulları ilə kompleks tədqiq olunmuşdur. Sistemin T-x faza diaqramı qurulmuşdur.

Göründüyü kimi, sistem kvazibinardır və ilkin birləşmələrin müxtəlif kristallik modifikasiyaları arasında fasiləsiz bərk məhlul sıraları əmələgəlməsi ilə xarakterizə olunur. Rentgenoqrafik analiz nəticəsində yüksək temperaturu kubik quruluşlu bərk məhlulların və otaq temperaturu tetraqonal quruluşlu dəyişən tərkibli fazaların bircinsliliyi təsdiq edilmiş və qəfəs parametrləri təyin olunmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, hər iki bərk məhlul sırasında qəfəs parametrləri tərkibin xətti funksiyasıdır, yəni, onlar Vegard qaydasını ödəyirlər.

Tədqiqatların bu mərhələsində həmçinin, Cd_3As_2 birləşməsi əsasında $\text{Cd}_{3-x}\text{Me}_x\text{As}_2$ (Me – Mn, Fe, Co, Ni) bərk məhlullarının alınması üzrə təcrübi işlər aparılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, bu bərk məhlullarda keçid metallarının qatılığı $x \leq 0.2$ mol %-ə çatır. Bu, həmin fazalara

	<p>maqnit xassələri verilməsi baxımından əhəmiyyət kəsb edən nəticədir.</p> <p>Alınmış bərk məhlul nümunələri növbəti mərhələdə maqnit xassələrinin tədqiqi üçün Tbilisi Dövlət Universitetinə təqdim edilmişdir.</p>
2	<p>Layihənin həyata keçirilməsi üzrə planda nəzərdə tutulmuş işlərin yerinə yetirilmə dərəcəsi (cari rüb üçün, faizlə qiymətləndirməli)</p> <p>(burada doldurmalı)</p>
3	<p>Hesabat dövründə alınmış elmi nəticələr, onların yenilik dərəcəsi</p> <p>(burada doldurmalı)</p> <p>Hesabat dövründə ilk dəfə olaraq MnTe-Sb₂Te₃-Te, MnTe-Bi₂Te₃-Te və Cd₃As₂-Zn₃As₂ üçlü, MnTe-GeTe-Sb₂Te₃, MnTe-Sb₂Te₃-Bi₂Te₃ kvaziüçlü və 3MnSe+Bi₂Te₃ ↔ 3MnTe+Bi₂Se₃ qarşılıqlı sistemlərində faza tarazlıqlarının tam mənzərələri alınmışdır. Tədqiq olunan sistemlərin həcmi T-x-y diaqramları, onların bir sıra şaquli və izotermik kəsikləri qurulmuş, maqnetik topoloji izolyator xassələri göstərəcəyi gözlənilən yeni birləşmə və dəyişən tərkibli fazalar alınmışdır. Qurulmuş faza diaqramları həmin birləşmə və bərk məhlulların istiqamətli sintezinin elmi əsaslarını təşkil edir.</p> <p>$m\text{MnTe} \cdot n\text{B}_2^{\text{V}}\text{Te}_3$ (B^V - Sb, Bi) homoloji sırasına aid aşkar edilmiş yeni birləşmələr, onlar əsasında Mn↔Ge, Sb↔Bi və Te↔Se əvəzləməli bir sıra bərk məhlul nümunələri, həmçinin Cd_{3-x}Zn_xAs₂ fazaları fərdi şəkildə sintez olunmuş, onların əmələgəlmə xarakteri, mayedən ilkin kristallaşma sahələri, kristal qəfəs tipləri və parametrləri təyin edilmişdir.</p> <p>Alınmış bütün bu elmi nəticələr yenidir və müvafiq fazaların istiqamətli sintezi və kristallarının yetişdirilməsi üçün istifadə ediləcəkdir.</p>
4	<p>Layihənin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə olunan üsul və yanaşmalar</p> <p>(burada doldurmalı)</p> <p>Tədqiqatlar differensial termiki analiz (DTA), rentgenfaza analizi (RFA), və skanedici elektron mikroskopiya (SEM) üsulları ilə aparılmışdır. DTA "NETZSCH 404 F1Pegasus system" və "Termoskan – 2" cihazlarında aparılmışdır. Nümunələrin toz difraktoqramları Almaniyanın Bruker firmasının D8 ADVANCE və D2 Phaser cihazlarında çəkilmiş və müvafiq difraktometrlərin kompüter təminatı proqramları ilə analiz edilmişdir. SEM analizi JEOLJSM-7600FJEOLJSM-7600F markalı skanedici elektron mikroskopunda aparılmışdır.</p> <p>Bəzi fazaların səthi və həcmi elektron quruluşları "Funksional sıxlıq nəzəriyyəsi" (Density functional theory) hesablamaları ilə müəyyən edilmişdir.</p>
5	<p>Layihə üzrə elmi nəşrlər (məqalələr, monoqrafiyalar, icmallar, konfrans materialları, tezislər) (dərç olunmuş, çapa qəbul olunmuş və çapa göndərilmişləri ayrılıqda qeyd etməklə) (surətlərini əlavə etməli!)</p> <p>(burada doldurmalı)</p> <p style="text-align: center;">1-3cü mərhələlər üzrə:</p> <p>1. Bayramova U.R., Babanly K.N., Ahmadov E.I., Mashadiyeva L.F., Babanly M.B.. Phase equilibria in the Cu₂S-Cu₈Si₆-Cu₈GeS₆ system and thermodynamic functions of phase transitions of the Cu₈Si_(1-x)Ge_xS₆ argyrodite phases // Journal of Phase Equilibria and Diff., 2023, v. 44, p. 509–519. https://link.springer.com/article/10.1007/s11669-023-01054-y (https://doi.org/10.1007/s11669-023-01054-y)</p>

2. Amiraslanova A.J., Babanly K.N., Imamaliyeva S.Z., Yusibov Yu.A., Babanly M.B. Phase equilibria in the $\text{Ag}_8\text{SiSe}_6\text{-Ag}_8\text{SiTe}_6$ system and characterization of solid solutions $\text{Ag}_8\text{SiSe}_{6-x}\text{Te}_x$ // Applied Chemical Engineering, 2023 Vol 6, Issue 2, p.1-9. <https://systems.enpress-publisher.com/index.php/ACE/article/view/2162> (<https://doi.org/10.24294/ace.v6i2.2162>)
3. Aghazade A.I., Orujlu E.N., Salimov Z.E., Mammadov A.N., Babanly M.B. Experimental investigation of the solid phase equilibria at 300 K in the $\text{SnBi}_2\text{Te}_4\text{-PbBi}_2\text{Te}_4\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ system // Physics and Chemistry of Solid State, V. 24, No. 3, 2023, p. 453-459. <https://journals.pnu.edu.ua/index.php/pcss/article/view/6855> (<https://doi.org/10.15330/pcss.24.3.453-459>)
4. Aghazade A.I., Babanly V.I., Gocayeva I.M., Orujlu E.N., Mammadov A.N. 3D modeling of phase diagram of the ternary $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ system // Azerbaijan Chemical Journal. 2023. №2, p.62-68. <https://akj.az/uploads/content/AghazadeAI.pdf> (<https://doi.org/10.32737/0005-2531-2023-2-62-68>)
5. Bairamova U.R., Babanly K.N., Mashadiyeva L.F., Yusibov Y.A., Babanly M.B. Phase Equilibria in the $\text{Cu}_2\text{Se-Cu}_8\text{SiSe}_6\text{-Cu}_8\text{GeSe}_6$ System. *Russ. J. Inorg. Chem.*, 2023, v. 68, p. 1611–1621. <https://link.springer.com/article/10.1134/S0036023623602027> (<https://doi.org/10.1134/S0036023623602027>)
6. Bayramova U.R., Babanly D.M., Mashadiyeva L.F., Akhmedov E.I., Babanly M.B. Calorimetric study of phase transition of the Cu_8GeSe_6 and comparison with other argyrodite family compounds // Chemical Problems, 2023, No 4 (21), p. 396-403 <https://chemprob.org/wp-content/uploads/2023/10/396-403.pdf> (<https://doi.org/10.32737/2221-8688-2023-4-396-403>)
7. Aghazade A.I., Rustamova S.M., Gojayeva I.M., Orujlu E.N., Babanly D.M., Mammadov A.N. Multi-3D modeling of phase diagram of $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ system // Chemical Problems, 2023, No 4 (21), p.353-360. <https://chemprob.org/wp-content/uploads/2023/09/353-360.pdf> (<https://doi.org/10.32737/2221-8688-2023-4-353-360>)

4-cü mərhələ üzrə:

8. Alverdiyev I.J., Imamaliyeva S.Z., Akhmedov E.I., Yusibov Yu.A., Babanly M.B. Thermodynamic Properties Of Some Ternary Compounds Of The Argyrodite Family // Azerbaijan Chemical Journal, 2023, No 4, p.21-30. <https://akj.az/en/journals/1048> (doi.org/10.32737/0005-2531-2023-4-21-30)
9. Babanly M.B., Yusibov Y.A., Imamaliyeva S.Z., Babanly D.M., Alverdiyev I.J. Phase Diagrams in the Development of the Argyrodite Family Compounds and Solid Solutions Based on Them (**Review**) // J. Phase Equilibria and Diffusion, 2024. <https://link.springer.com/article/10.1007/s11669-024-01088-w> (<https://doi.org/10.1007/s11669-024-01088-w>)
10. Orujlu E.N., Seidzade A.E., Babanly D.M., Amiraslanov I.R., Babanly M.B.. New insights into phase equilibria of the $\text{SnTe-Bi}_2\text{Te}_3$ pseudo-binary system: Synthesis and crystal structure of new tetradymite-type compound $\text{Sn}_3\text{Bi}_2\text{Te}_6$ // Journal of Solid State Chemistry, 2024, V. 330, p.124494. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002245962300662X?via%3Dihub> (<https://doi.org/10.1016/j.jssc.2023.124494>)

6	İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər (burada doldurulmalı) Hesabat dövründə layihə üzrə ixtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər olmamışdır.
7	Layihə üzrə ezamiyyətlər (burada doldurulmalı) Hesabat ilində layihə rəhbəri prof. M.B.Babanlı aşağıdakı ezamiyyətlərdə olmuşdur: 1) 16 -20 oktyabr 2023 il tarixində Rusiya Federasiyasının Moskva şəhəri; Moskva Dövlət Universiteti. 2) 4-9 dekabr 2023 il tarixində Gürcüstanın Tbilisi şəhərində; İvan Cavaxişvili ad. Tbilisi Dövlət Universiteti. 3) 21-27 aprel 2024-cü il tarixində İspaniyanın San-Sebastyan şəhərində; Donostiya Beynəlxalq Fizika Mərkəzi.
8	Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak (burada doldurulmalı) Layihə üzrə elmi ekspedisiya nəzərdə tutulmamışdır.
9	Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak (burada doldurulmalı) İştirak edilməmişdir
10	Layihə mövzusu üzrə elmi məruzələr (seminarlar, konfranslar, dəyirmi masalar və s. çıxışlar) (burada doldurulmalı) Layihə mövzusu üzrə elmi seminar keçirilmiş və alınmış bir sıra nəticələr müzakirə edilmişdir.
11	Layihə üzrə əldə olunmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar (burada doldurulmalı) Hesabat dövründə layihədə nəzərdə tutulmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar hələlik alınmamışdır.
12	Yerli həmkarlarla əlaqələr (burada doldurulmalı) Layihə üzrə bəzi tədqiqatlar Bakı və Gəncə Dövlət Universitetlərinin əməkdaşlarının iştirakı ilə aparılmışdır.
13	Xarici həmkarlarla əlaqələr (burada doldurulmalı) Layihə üzrə tədqiqatlar Rusiya, Gürcüstan və İspaniyadan olan həmkarlarımızla sıx əlaqələr şəraitində yerinə yetirilir.
14	Layihə mövzusu üzrə kadr hazırlığı (burada doldurulmalı) 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 (burada doldurulmalı) Sərgilərdə iştirak edilməyib.
16	Təcrübəartırmada iştirak və təcrübə mübadiləsi (burada doldurulmalı) 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.

(burada doldurmalı)

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 29.04.2024

QEYD: bütün hallarda uyğun olan bəndlər doldurulmalıdır.

