



AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA ELMİN İNKİŞAFI FONDU

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Elmin İnkişafı Fondu
və Rusiya Fundamental Tədqiqatlar Fondunun
1-ci Azərbaycan-Rusiya birgə beynəlxalq qrant
müsabiqəsinin (EIF-BGM-4-RFTF-1/2017) qalibi olmuş
layihənin yerinə yetirilməsi üzrə
(rüblük olaraq 1-ci mərhələ)

ELMİ-TEXNİKİ HESABAT

Layihənin adı: Nanoelektronikada tətbiq üçün tərkibində III qrup xalkogenidləri saxlayan bərk məhlullar, qrafen və ifrat nazik silisium təbəqələri əsasında alınmış 2D sistemlərdə defektmələgəlmənin mexanizmi və kvant halları

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: Əsədova Solmaz Nəriman qızı

Qrantın məbləği: 16 250 manat

Layihənin nömrəsi: EIF-BGM-4-RFTF-1/2017-21/05/1-M-07

Müqavilənin imzalanma tarixi: 15 fevral 2022-ci il

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: 18 ay

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): 01 mart 2022-ci il - 01 sentyabr 2023-ci il

Layihənin I mərhələ üzrə (rüb) məbləği:

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

1	Layihənin həyata keçirilməsi üzrə cari rübdə yerinə yetirilmiş elmi işlər (burada doldurmalı) Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində altıbucaqlı quruluşa malik olan yarımkeçirici qallium monosulfidin (GaS) elektron xassələri xüsusi nöqtəvi defektlərin (vakansiyalar) təsiri nəzərə alınmaqla modelləşdirilmişdir.
2	Layihənin həyata keçirilməsi üzrə planda nəzərdə tutulmuş işlərin yerinə yetirilmə dərəcəsi (cari rüb üçün, faizlə qiymətləndirməli) (burada doldurmalı) cari rüb üçün: 100 faiz
3	Hesabat dövründə alınmış elmi nəticələr , onların yenilik dərəcəsi (burada doldurmalı) Alınmış elmi nəticələr ilk dəfə bu layihə çərçivəsində alınıb və onların yenilik dərəcəsi dünya yeniliyi səviyyəsindədir.
	Giriş Yarımkeçiricilər sənayesinin uğuru inteqral sxemlərin məhsuldarlığının təkmilləşdirilməsindən və onların istehsal xərclərinin azaldılmasından asılıdır. Bu adətən inteqral sxemlərin, məsələn, metal-

oksid-yarımkəçirici sahə effektiv tranzistorın (MOSFET), əsas “tikinti” blokunun ölçüsünü azaltmaqla əldə edilir.

Son 10-15 il ərzində MOSFET tranzistorların ölçülərinin azaldılmasını təmin etmək üçün yüksək k-lı dielektriklər, metal “qapılar”, aşağı k-dielektriklər və mis əsaslı keçiricilər kimi yeni materiallar işlənmişdir.

Bu yaxınlarda “çoxqapılı” (FinFETs) yeni qurğular, planar tranzistorları əvəz etməyə başlayıb. Cihazın ölçüsünü dəyişmək üçün germanium, III-V və III-VI birləşmələri kimi yüksək daşıyıcı mütəhərrikəliyə malik və silisiyuma alternativ olan materiallar gələcək cihazlarda “kanal” kimi istifadə edilə bilər.

Layihənin bu mərhələsi müxtəlif politipə malik olan 2D quruluşlu monosulfid qallium GaS materialının b-politipi ilə bağlı olan bizim əldə etdiyimiz son nəzəri və eksperimental tədqiqata dair əsas məlumatı və elmi nəticələri vermək **məqsədi** daşıyır.

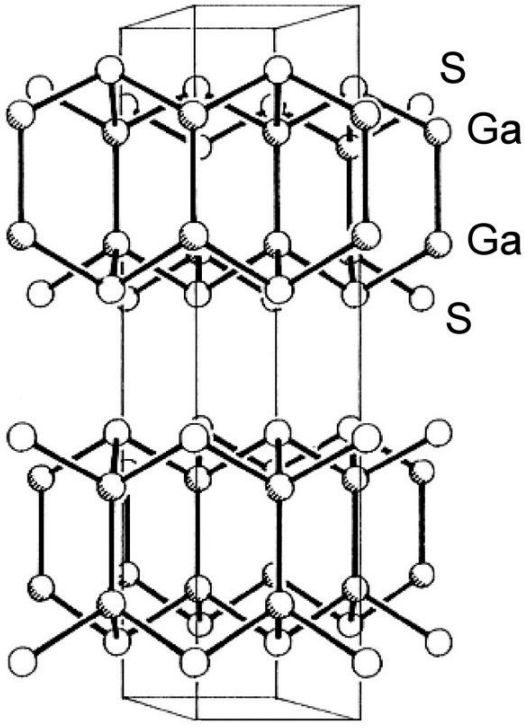
Mərhələ 1-də monosulfid qallium üzrə aparılan tədqiqata həsr olunub, əvvəlcə onun elektron zona quruluşunun təməl prinsiplərindən modeləşdirilməsi və simulyasiyalarından alınan yeni nəticələr verilib.

GaS proqnozlaşdırılacaq xassələri gələcək mərhələlədə müzakirə ediləcək. Daha sonra onun GaS-in nümunələrində və cihaz inteqrasiyasında yeniliklər, elektrik xarakteristikası və cihazın hazırlanması üçün metal kontaktlarla bağlı problemlər, onun yüksək tezliklərdə potensial istifadəsinə baxılacaq. Analoji tətbiqlər, eləcə də yüksək elektrik sahəsi və istilik daşıma xüsusiyyətlərinin tədqiqi əhəmiyyətlidir.

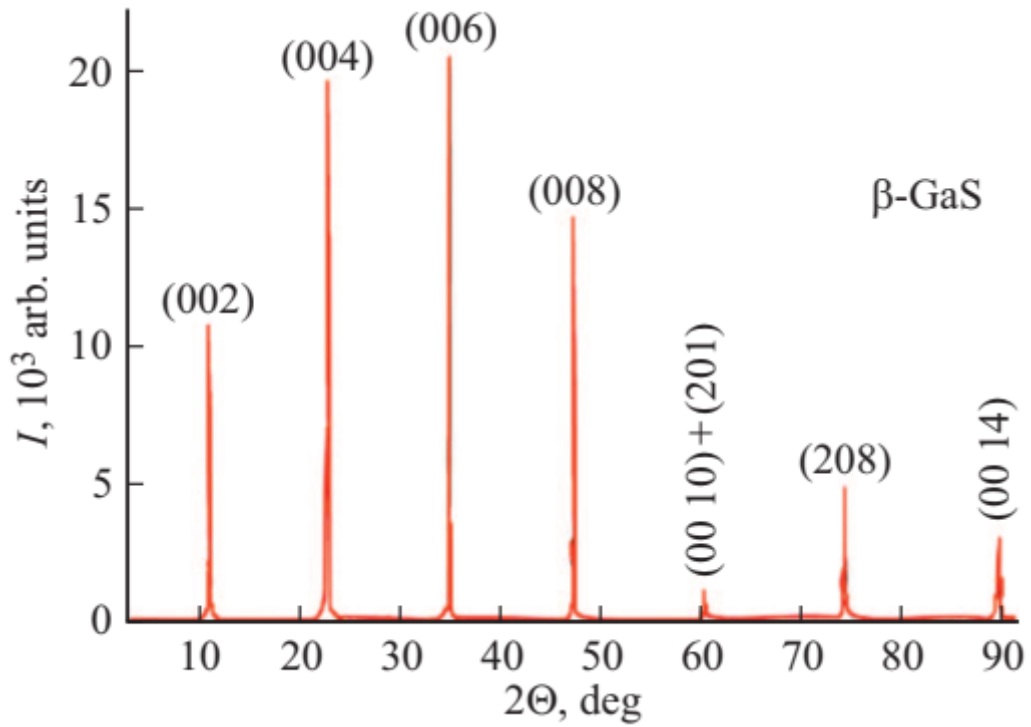
Nəticələr və müzakirə

GaS kristalının sintezi

GaS polikristalları evakuasiya edilmiş kvarts ampulasında yüksək təmizliyə malik ilkin elementlərin (Ga və S) kimyəvi qarşılıqlı təsiri üsulu ilə sintez edilmişdir. X-şüalarının difraksiyası (XRD) və mikroskopik analizlərə görə, GaS polikristalları altıbucaqlı fazadan ibarətdir (**Şəkil 1**).



Şəkil 1. ϵ -GaS-in sxematik atom quruluşu.



Şəkil 2. ϵ -GaS monokristalın toz halındakı nümunəsinin rentgendifraksiya spektri. $T = 298 \text{ K}$.

GaS-in altıbucaqlı ϵ -fazasının rentgenoqramlarındakı pikləri (zirvələri) (002), (004), (006), (008) və (208) rentgen şüalarının difraksiya nümunələrində tapılır. GaS-in difraksiya zirvələri $a = 3,583 \pm 0,002$

\AA , $c = 15,475 \pm 0,005 \text{ \AA}$ (**Şəkil 2**) parametrlərinə və ϵ -GaS (P63, qr/mmc) üçün JCPDS xəritə № 30-0576 məlumatlarına uyğundur. (194), $a = 3,587 \text{ \AA}$ və $c = 15,492 \text{ \AA}$).

İstənilən GaS politipinin stexiometrik tərkibə malik monokristalını böyümə (cücərmə) temperaturlarında ($< 1230 \text{ K}$) xalkogenin uçuculuğuna görə yetişdirmək çətinidir. Bu mərhələdə GaS monokristalları Bridgman üsulu ilə alınmışdır. GaS-in identifikasiyası və müqayisəsi üçün istinad strukturu kimi GaS-in quruluş baza məlumatlarından (JCPDS kartı № 30-0576) istifadə edilmişdir.

Bizim tərəfimizdən yetişdirilmiş GaS monokristalları yüksək fotoelektrik və dielektrik xüsusiyyətlər göstərmişdir. GaS monokristalları sarı rəngdə alınır. 1273 K temperaturda vakuumda 5 saat müddətində tavlandıqdan sonra GaS nümunələri daha açıq rəng alır. Nisbətən yüksək artım sürətində ($>2 \text{ mm/saat}$) yetişən GaS monokristallar nöqtəvi defektlərə malikdir. Bu struktur qüsurları GaS-in dielektrik və elektrik xassələrinə təsir göstərir.

Hesablama üsulu

Hesablamalar psevdopotensialda müstəvi dalğalarından istifadə etməklə DFT metodu əsasında aparılmışdır [1-5]. Tərkibində müvafiq olaraq 36 və 48 atom olan GaS superqəfəslərindən, həmçinin Ga və S atomlarının vakansiyalarından (qəfəsdə boş yerlər) istifadə edilmişdir. Mübadilə-korrelyasiya enerjisini hesablamaq üçün lokal sıxlıq yaxınlaşmasından (LDA) [1,2] və ümumiləşdirilmiş qradiyent yaxınlaşmasından (GGA) [3] istifadə edilmişdir.

Ga və ya S vakansiyaları olan GaS superqəfəslərin DFT hesablamaları Brillouin zonası üzərində ədədi inteqrasiyası Monkhorst-Pack sxemi [4] ilə aparılmışdır. Hesablamalar $2 \times 2 \times 2$ k-nöqtəli şəbəkədə istifadə edilərək həyata keçirilmişdir. Müstəvi dalğaların sferasını təyin edən E_{cut} kəsmə kinetik enerjisi 410 eV idi. E_{cut} -un maksimum dəyəri 2040 eV -dən çox olmamışdır [5].

[1] J.P. Perdew, W. Yue. Phys. Rev. B 33, 8800 (1986). <https://doi.org/10.1103/physrevb.33.8800>

[2] J.P. Perdew, J.A. Chevary, S.H. Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson, D.J. Singh, C. Fiolhais. Phys. Rev. B. 46, 6671 (1992). <https://doi.org/10.1103/physrevb.46.6671>

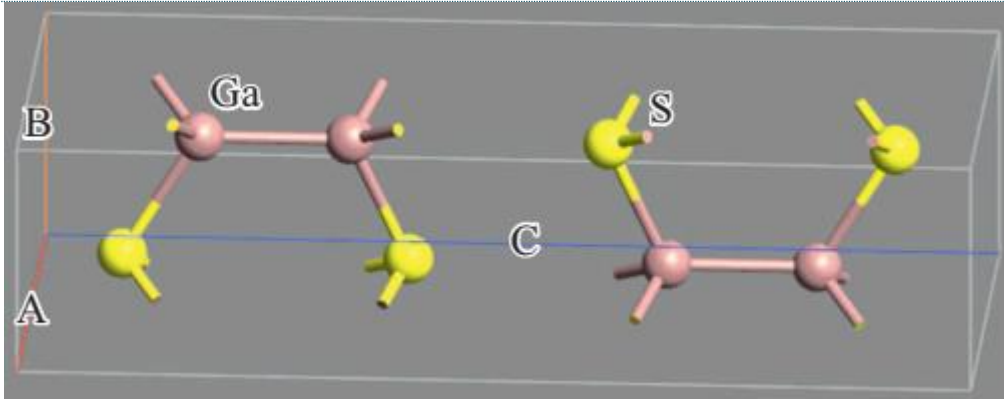
[3] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.3865>

[4] H.J. Monkhorst. Phys. Rev. B 13, 5188 (1976). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>

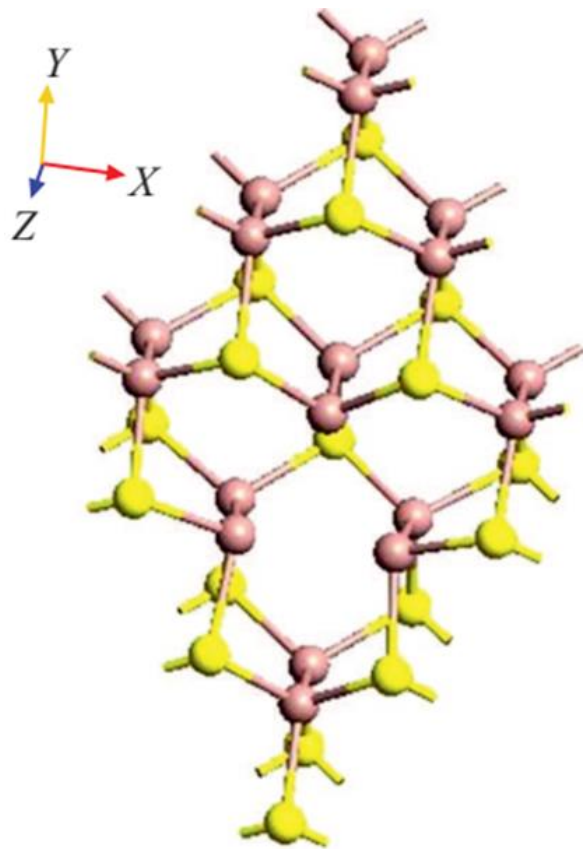
[5] M.M. Asadov, S.N. Mustafayeva, S.S. Guseinova, V.F. Lukichev, D.B. Tagiev. Phys. Solid State 63, 797 (2021). <https://doi.org/10.1134/S1063783421050036>

Atom strukturu

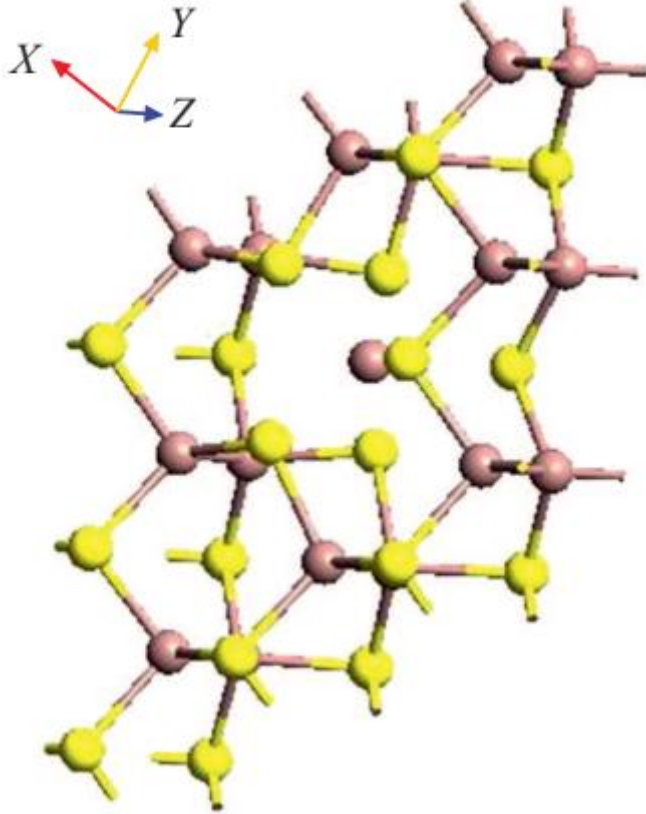
Şəkil 3-də GaS birləşməsinin primitiv atom quruluşu, **şəkil 4**-də isə təmiz və qallium vakansiyası olan GaS superqəfəsin atom strukturları göstərilmişdir.



Şəkil 3. GaS birləşməsinin primitiv atom quruluşu.



Şəkil 4a. 36 atomlu təmiz GaS superqəfəsinin atom strukturu.



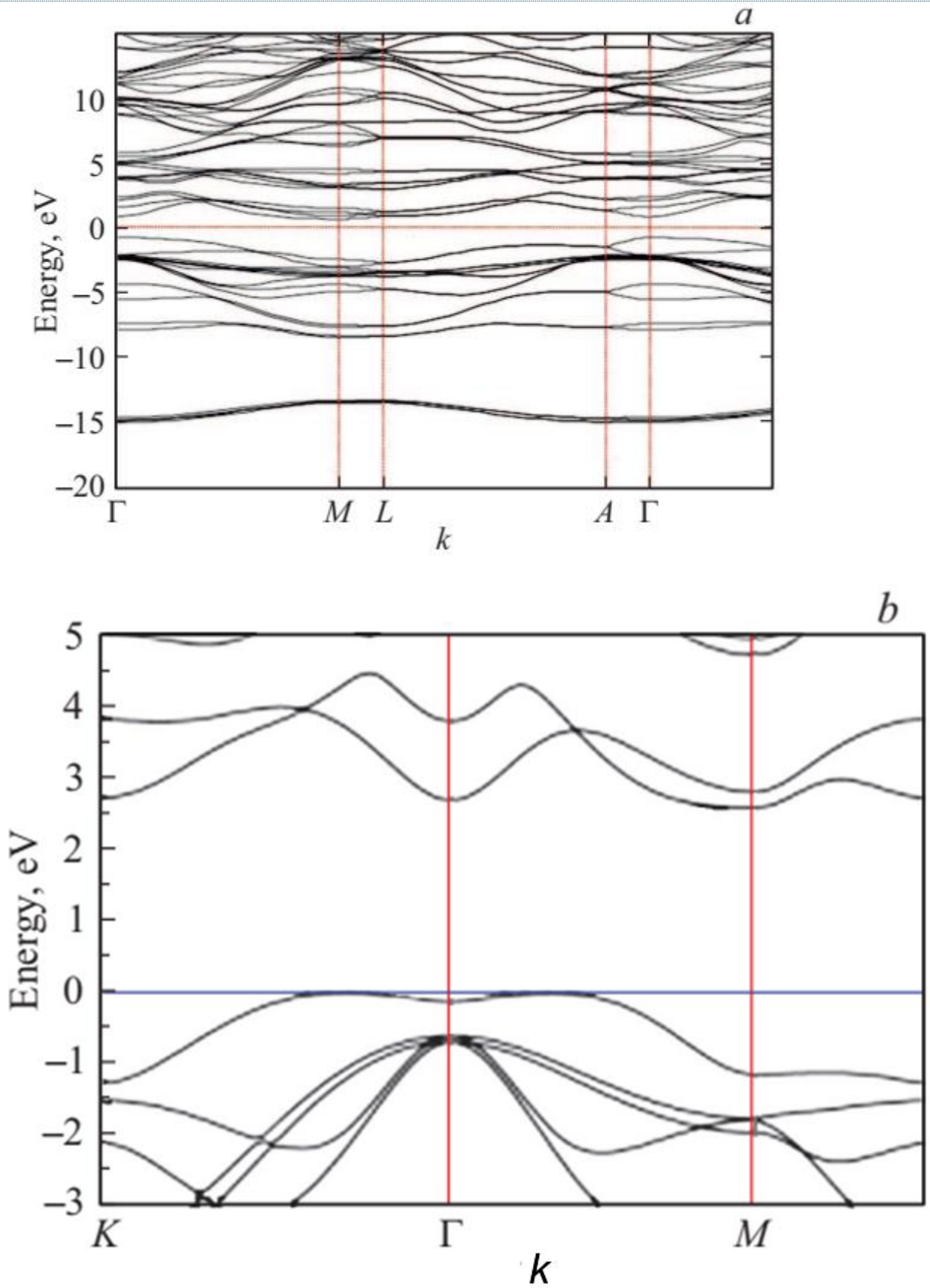
Şəkil 4b. 36 atomlu qallium vakansiyası (boşluğu) olan GaS superqəfəsinin atom strukturu.

Elektron strukturu

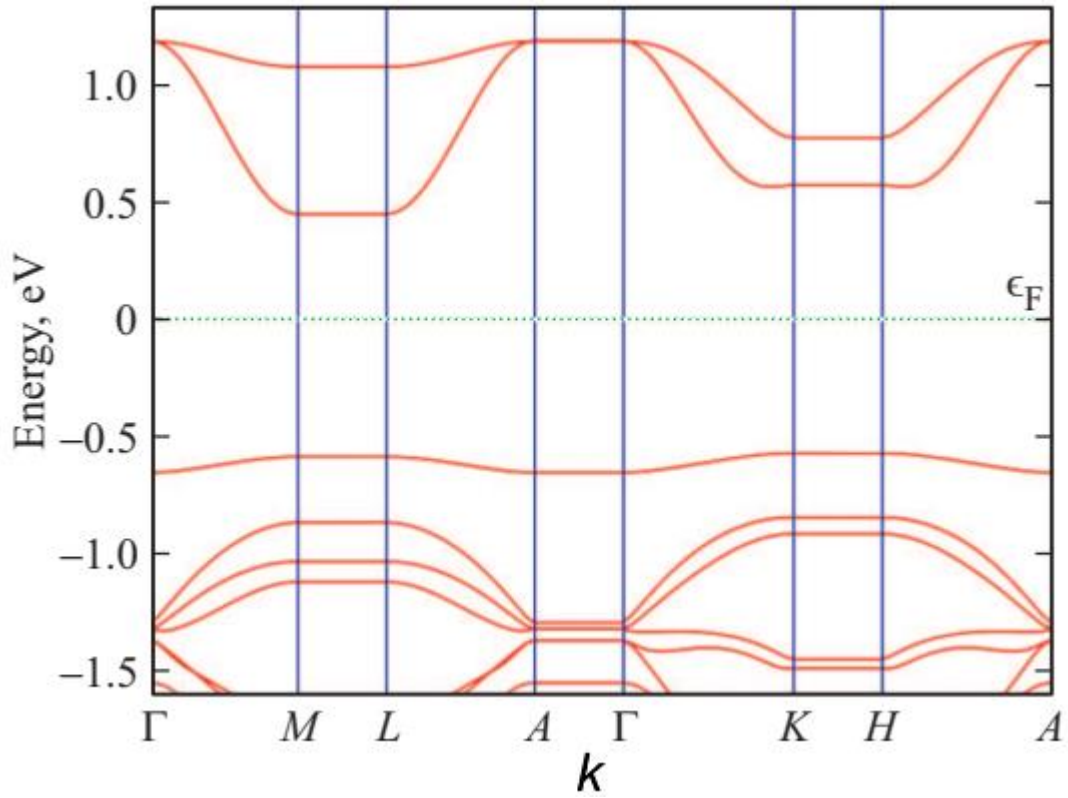
GaS-in elektron xassələri vakuumda mükəmməl, laylı, müstəqil və sonsuz GaS kristalının elektron quruluşu ilə yaxşı təsvir edilmişdir. Bu nəzəri yanaşma, bir neçə cəhətdən ideallaşdırmadır, çünki hər bir "real" sistemin (materialın) defektləri var və bu quruluşlar əlbəttə ki, sonludur və vakuumda deyil. Belə bir ideallaşdırılmış hal nəzəri cəhətdən baxıla bilər və buna görə də çoxlu informasiya verə bilər. GaS-in elektron zolaq strukturu və hallar sıxlığı (DOS) üçün bir neçə nəzəri yaxınlaşmanın nəticələri layihənin bu mərhələsində alınmışdır.

Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində altıbucaqlı quruluşa malik olan yarımkəçirici qallium monosulfidin (GaS) elektron xassələri xüsusi nöqtəvi defektlərin (vakansiyalar) təsiri nəzərə alınmaqla, LDA və GGA yaxınlaşmaları ilə modelləşdirilmişdir.

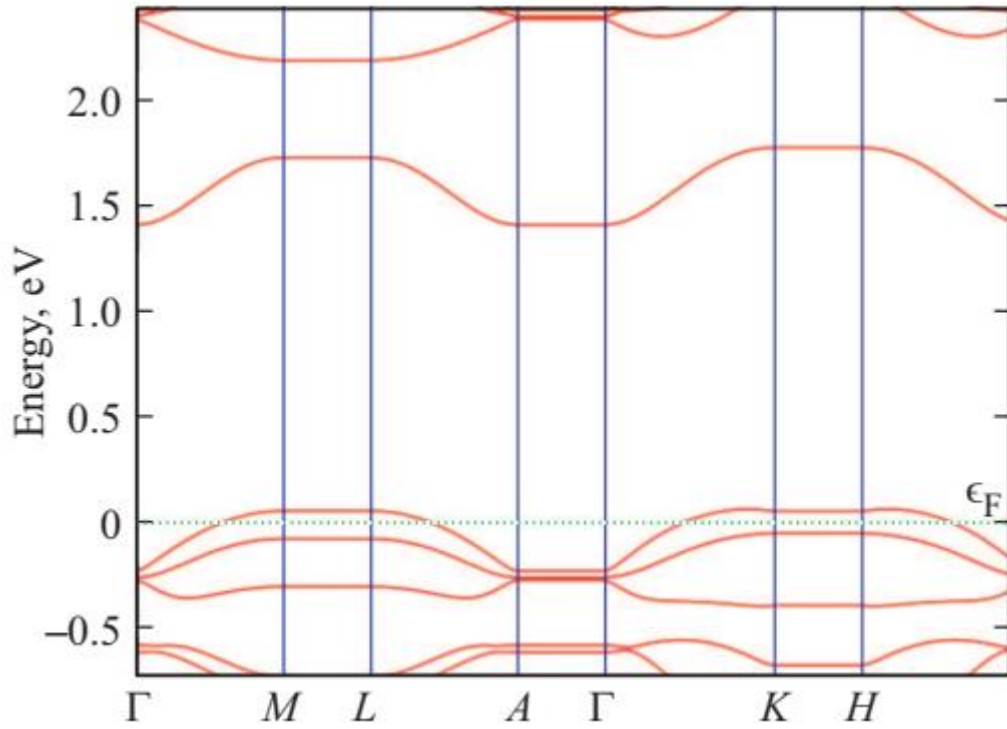
Müəyyən edilmişdir ki, sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində GaS kristalının b-politipinin (altıbucaqlı quruluş, sp. gr. P63/mmc: $a = 3.583 \text{ \AA}$, $c = 15.475 \text{ \AA}$) hesablanmış elektron xassələri (**Şəkil 5**), təcrübi qiymətlərlə yaxşı uyğunluq təşkil edir. GaS yüksək müqavimətə və 300 K-da $E_g = 2.5 \text{ eV}$ energetik zolaq boşluğuna malikdir.



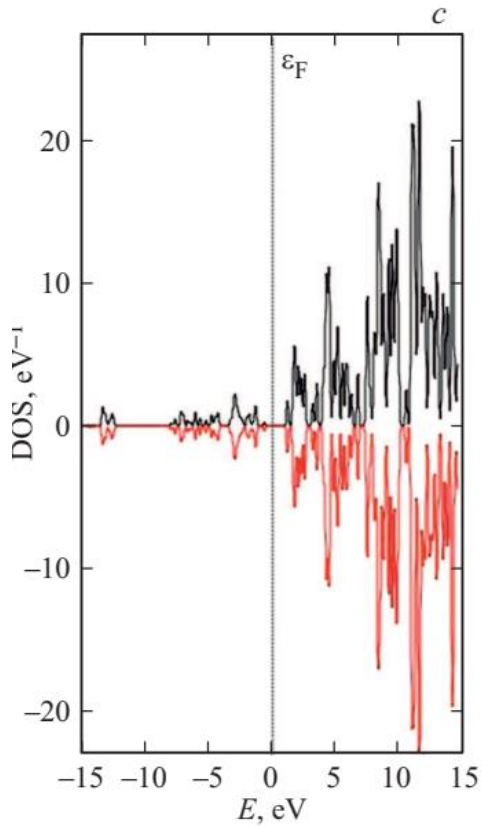
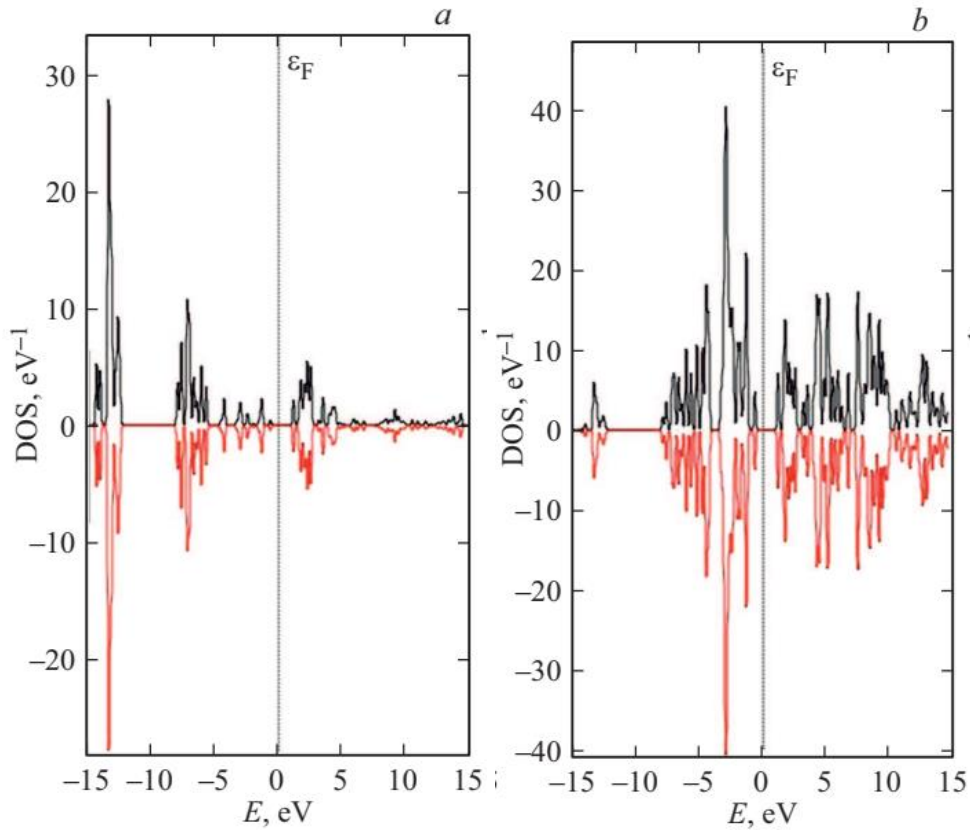
Şəkil 5. 45 atomlu GaS superqəfəsinin ab initio metodu ilə hesablanmış enerjetik zona quruluşu. a) LDA yaxınlaşması; b) LDA + GGA yaxınlaşması.



Şəkil 6a. Kükürd vakansiyası olan 36 atomlu GaS superqəfəsinin ab initio metodu ilə (LDA yaxınlaşması) hesablanmış enerjetik zona quruluşu.



Şəkil 6b. Qallium vakansiyası olan 36 atomlu GaS superqəfəsinin ab initio metodu ilə (LDA yaxınlaşması) hesablanmış enerjetik zona quruluşu.



Şəkil 7. S-vakansiyasını (model Ga18S17) ehtiva edən GaS supercellin elektron sıxlığı (DOS). spin yuxarı və spin aşağı halları a) s-hal, b) p-hal, c) d-hal

Nəticələr

Müəyyən edilmişdir ki, yaranan GaS monokristalları (altıbucaqlı quruluş, sp. gr. P63/mmc: $a = 3,583 \text{ \AA}$, $c = 15,475 \text{ \AA}$) yüksək müqavimətə və 300 K-da $E_g = 2,5 \text{ eV}$ qadağan olunmuş zolaq eninə malikdir.

Təcrübi yolla müəyyən olunmuşdur ki, GaS monolayının elektron şüalanması nəticəsində onun elektrik keçiriciliyi azalır. Bu azalma GaS-in quruluşunda nöqtəvi defektlərin əmələ gəlməsi səbəbindən baş verir.

DFT-hesablamaları aparmaq üçün 36 və 48 atomlu GaS superqəfəslərinin modelləri və hesablama detalları hazırlanmışdır. Seçilmiş superqəfəslərin zona quruluşu, electron sıxlığı halları və energetik xassələri hesablanmışdır.

DFT hesablamaları ilə GaS-in əmələ gəlmə enerjisinin və Ga və S atomlarının vakansiyalarının xassələrə təsiri tədqiq edilmişdir.

GaS birləşməsinin tərkibinin qallium və kükürdün kimyəvi potensiallarının qiymətinə təsiri öyrənilmişdir.

4 Layihənin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə olunan üsul və yanaşmalar

(burada doldurmalı)

Fiziki xassələrin ölçülməsi metodları, nanomodellərdən hazırlanması, funksional sıxlıq nəzəriyyəsi, lokal sıxlıq yaxınlaşması (LDA), Ümumiləşdirilmiş gradient yaxınlaşması (GGA), kvant-kimyəvi hesablamalar.

5 Layihə üzrə elmi nəşrlər (məqalələr, monoqrafiyalar, icmallar, konfrans materialları, tezislər) (dərəcə olunmuş, çapa qəbul olunmuş və çapa göndərilmişləri ayrılıqda qeyd etməklə) *(surətlərini əlavə etməli!)*

(burada doldurmalı)

Məqalə (xaricdə) (İmpakt-faktorlu jurnallarda – 1 məqalə)

Асадов М.М., Мустафаева С.Н., Гусейнова С.С., Лукичев В.Ф., Тагиев Д.Б. Моделирование структурных и энергетических характеристик атомов в 2D-кристалле GaS с точечными дефектами // Физика твердого тела. 2022. Том 64. Вып. 1. С.46-59.

<https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/51830>

6 İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər

(burada doldurmalı)

Yox

7 Layihə üzrə ezamiyyətlər

(burada doldurmalı)

Yox

8 Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak

(burada doldurmalı)

Yox

9 Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak

(burada doldurmalı)

10	Layihə mövzusu üzrə elmi məruzələr (seminarlar, konfranslar, dəyirmi masalar və s. çıxışlar) (burada doldurulmalı) Yox
11	Layihə üzrə əldə olunmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar (burada doldurulmalı) Yox
12	Yerli həmkarlarla əlaqələr (burada doldurulmalı) 1 məqalə dərc edilib (FTT. 2022. No 1) https://doi.org/10.21883/FTT.2022.01.51830.182 . http://journals.ioffe.ru/issues/83
13	Xarici həmkarlarla əlaqələr (burada doldurulmalı) 1 məqalə dərc edilib (FTT. 2022. No 1) https://doi.org/10.21883/FTT.2022.01.51830.182 . http://journals.ioffe.ru/issues/83
14	Layihə mövzusu üzrə kadr hazırlığı (burada doldurulmalı) Yox
15	Sərgilərdə iştirak (burada doldurulmalı) Yox
16	Təcrübəartırmada iştirak və təcrübə mübadiləsi (burada doldurulmalı) Yox
17	Layihə mövzusu ilə bağlı elmi-kütləvi nəşrlər, kütləvi informasiya vasitələrində çıxışlar, yeni yaradılmış internet səhifələri və s. (burada doldurulmalı) Yox

Layihə rəhbərinin imzası _____ Əsədova Solmaz Nəriman qızı

Tarix _____

QEYD: bütün hallarda uyğun olan bəndlər doldurulmalıdır.