



## AZƏRBAYCAN ELM FONDU

Azərbaycan Elm 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 3-cü 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 mart 2023-cü il**

Layihənin **III mərhələ** üzrə (rüb) məbləği: :

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

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

(burada doldurmalı)

**3-cü mərhələ.** Qrafenin (GP)  $5 \times 5$  superqəfəsləri formalaşdırılmış və GP-nin səthində hesablamalar aparılmışdır. Qızıl atomlarının qrafenin (GP) səthinə adsorbsiyasının modelləşdirilməsi aparılmışdır.

$GP < Au_{ads} >$  və monovakansiyalı  $GP_V < Au_{ads} >$   $5 \times 5$  superqəfəslərinin lokal spin sıxlığı yaxınlaşmasından (LSDA) istifadə edilmişdir. Elektron sıxlığının funksionalı nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində hesablamalar aşağıdakıları müəyyən etməyə imkan vermişdir.

Qrafenin superqəfəslərinin səthində verilmiş karbon atomunun yaxınlığındakı hissədə adsorbsiya edilmiş qızıl atomlarının  $Au_{ads}$  C-C əlaqəsinə təsiri müxtəlif enerjiyə malikdir. GP-in səthində  $Au_{ads}$  yerləşməsinin üç halı hesablanmışdır (tetraedral konfigurasiya; T sahəsi; C-C əlaqəli körpü B sahəsi və 6 bucaqlının boşluqlarındakı H sahəsi). Hesablanmış adsorbsiya enerjisinin qiymətləri göstərir ki, enerji baxımından T sahəsində adsorbsiya zamanı yaranan strukturlar daha stabildir.

Qrafen səthində karbon vakansiyaları formalaşdırılmış və onların əmələ gəlməsi enerjisinin hesablanmışdır. Qrafen əsaslı materiallarda zona quruluşu və elektron sıxlığının paylanması hesablanmışdır və elektronların köçürülməsi xassələri tədqiq edilmişdir.  $GP < Au_{ads} >$  və  $GP_V < Au_{ads} >$  adsorbsiya komplekslərində zona quruluşu və hallar sıxlığının hesablanması göstərir ki, bu komplekslərdə yük daşıyıcıları lokallaşmışdır və onların hərəkəti yükün diffuziyasında əhatə edir.

Qrafen superqəfəslərində qızıl atomunun ( $Au_{ads}$ ) adsorbsiyasının LDA ilə hesablanmış adsorbsiya enerjiləri ( $E_{ads}^T$ ) nisbətən aşağıdır. Spin polarizasiyasının hesablamada nəzərə alınması qrafen əsaslı strukturlarda  $Au_{ads}$  adsorbsiya enerjisinin qiymətlərini dəqiqləşdirməyə imkan vermişdir. Adsorbsiya enerjilərinin  $E_{ads}^T$  LSDA üsulu ilə hesablanmış qiymətləri, spin korreksiyasını nəzərə alanda, LDA ilə hesablanmış  $E_{ads}^T$ -dən yüksəkdir.  $GP_V < Au_{ads} >$  strukturunun  $Au_{ads}$ -in adsorbsiya enerjisi  $E_{ads}^T$ , defektsiz  $GP < Au_{ads} >$   $E_{ads}^T$ -dən aşağıdır.  $GP < Au_{ads} >$  və  $GP_V < Au_{ads} >$ -da adsorbsiya enerjisi səthin qüsursuzluğundan (defektlərdən) asılıdır və səthin defektliyi azaldıqca  $E_{ads}^T$  azalır.

LSDA üsulu ilə  $5 \times 5$  qrafen  $GP < Au_{ads} >$  və  $GP_V < Au_{ads} >$  superqəfəsləri üçün hesablanmış lokal maqnit momentləri ( $\mu_B$ ) bir-birindən fərqlənir. Spin-orbital qarşılıqlı təsirini və Au-nun f-atom vəziyyətlərinin parçalanmasını nəzərə alaraq,  $GP < Au_{ads} >$  superqəfəslərinin ümumi maqnit momenti hesablanmışdır.  $GP_V < Au_{ads} >$  superqəfəsdə ümumi lokal maqnit momentinin qiyməti artır.  $GP_V < Au_{ads} >$  superqəfəsdə vakansiya yaxınlığındakı maqnit momenti karbon vakansiyasının səthdəki yerindən asılıdır.

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

(burada doldurmalı)

Cari (3-cü) 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.

### 1. Giriş

Qrafen (GP) perspektivli material kimi, məsələn, nanoelektronika və spintronikada ikiölçülü oturaq təvəqənin (substratın) formalaşması üçün istifadə edilir və öyrənilir. Qrafenin səthində müxtəlif metalların adsorbsiyasının öyrənilməsi üzrə eksperimental və nəzəri məlumatlar məlumdur. Qrafenin səthində metal atomlarının (adatomların) adsorbsiyası yük daşıyıcılarını qütbləşdirməyin effektiv üsuludur. Qrafendə maqnetizmin tədqiqi göstərdi ki, GP-də lokal maqnit momentinin əmələ gəlməsi səthdəki qüsurların (defektlərin) həm konsentrasiyası, həm də həndəsəsindən asılıdır.

Qrafen səthində metal atomlarının adsorbsiyasının hesablamaları göstərir ki, hesablanmış xarakteristikalar (adsorbsiya enerjisi, maqnit momenti) müxtəlif amillərdən asılıdır. Bunlara aşağıdakıları daxil etmək olar: hesablama üsulu, adatomun quruluşu, adsorbsiya yeri (yuxarıdan, körpü və boşluqlarda yerləşmə, adatomla səth arasındakı məsafə, adatom və qrafen arasındakı qarşılıqlı təsirin xarakteri, substratın quruluşu.

Layihənin bu mərhələsində aktual problem olan 2D quruluşlu qrafenlə bağlı bizim əldə etdiyimiz son tədqiqatlara dair **elmi nəticələr** verilib.

### 2.1 GP səthində metalların adsorbsiyası prosesində elektron quruluşunun modeləşdirilməsi

Nanoelektronika üçün vacib materialların quruluşunun nanoquruluş vəziyyətinə çevrilməsi, bu

materialların fiziki xassələrində nəzərəcarpacaq dəyişikliklərə səbəb ola bilər [1-3].

[1] Asadov M.M., Guseinova S.S., Lukichev V.F. Ab Initio Modeling of the Electronic and Energy Structure and Opening the Band Gap of a 4p-Element-Doped Graphene Monolayer // Russian Microelectronics. 2020. V. 49. № 5. P. 314–323. <https://doi.org/10.1134/S1063739720050030>

[2] Asadov M.M., Mustafaeva S.N., Guseinova S.S., Lukichev V.F., Tagiev D.B. Ab Initio Modeling of the Effect of the Position and Properties of Ordered Vacancies on the Magnetic State of a Graphene Monolayer // Physics of the Solid State. 2021. Vol. 63. No 5. P. 680–689. <https://doi.org/10.1134/S1063783421050036>

[3] Asadov M.M., Mustafaeva S.N., Guseinov S.S., Lukichev V.F. Ab Initio Calculations of the Electronic Properties and the Transport Phenomena in Graphene Materials // Physics of the Solid State. 2020. V. 62. № 11. P. 2224–2231. <https://doi.org/10.1134/S1063783420110037>

Materialın səth sahəsinin onun həcminə nisbətində artımı və hissəciklərin kvant effektiv sahəyə köçürülməsi belə materialların, xüsusən də qrafenin (GP) fiziki xassələrinin dəyişməsinə mühüm amillərdir. Bu xassələrə elektron keçiriciliyi, termiki sabitlik, struktur elastikliyi və böyük xüsusi səth sahəsi daxildir.

Qrafen təbəqənin struktur xüsusiyyətləri yük daşıyıcılarının GP-nin səthində sərbəst hərəkət etməsinə imkan verir ki, bu da müasir cihazların miniaturlaşdırılması üçün vacibdir. Araşdırmalar, enerji boşluğunu və yük daşıyıcılarının konsentrasiyasını qrafendə dəyişdirmək və otaq temperaturunda kvant Hall təsirini müşahidə etmək ehtimalını göstərir. Qrafenin xassələrini dəyişdirmək üçün həm kimyəvi, həm də fiziki quruluş dəyişdirmə üsullarından istifadə olunur.

GP səthində metalların adsorbsiyasına dair məlum işlərdə əsasən defektsiz (qüsursuz) GP xassələri öyrənilmişdir. Eyni zamanda müxtəlif mübadilə-korrelyasiya funksiyalarından ( $E_{XC}$ ) istifadə edilmişdi. Bununla belə, səth qüsurları elektron, maqnit və mexaniki xassələrə əhəmiyyətli dərəcədə təsir göstərir. Bunu nəzərə alaraq, qrafen səthinin adsorbsiyasını və elektron xassələrini öyrənmək aktualdır. Bu işdə biz “vakansiya + adatom  $Au_{ads}$ ” kompleksləri daxil olmaqla qrafen əsasında strukturların electron xassələrini hesablamışıq.

Bu mərhələdə məqsəd qrafen superqəfəslərinin səthində  $Au_{ads}$  adsorbsiya enerjisinin Ab-initio hesablanmasıdır. Biz həm  $GP < Au_{ads} >$ , həm də tərkibində nöqtəvi defektlər saxlayan ( $GP_V < Au_{ads} > V$  - vakansiya) strukturların electron xassələrini hesablamışıq.

Beləliklə, nanoelektronika və spintronika üçün perspektiv olan laylı quruluşlu 2D materialların, o cümlədən qrafenin (GP) xassələrinin kompüter modelləşdirilməsi aparılmışdır. 50 karbon atomlu qrafen əsaslı superqəfəslərinin atom və elektron quruluşları relaksasiya edilmiş və parametrləri təyin edilmişdir. Qrafen səthində “vakansiya + Au adatom” kompleksi olan superqəfəslərin stabil konfiqurasiyaları müəyyən edilmişdir. GP-də adatomun və “vakansiya + Au adatom” kompleksinin zona quruluşuna və local maqnit momentinə defektlərin və adatomun təsiri hesablanmışdır. “Vakansiya + adatom” kompleksi iştirakında qrafen əsasında səthdə elektron strukturun dəyişməsi hesablanmış və nəticələrin təhlili aparılmışdır. ( $GP < Au_{ads} >$ ,  $GP_V < Au_{ads} >$  sistemləri üçün tarazlıq atom konfiqurasiyası, elektron vəziyyətlərin lokal sıxlığı və spin polarizasiyası nəzərə alınaraq hesablanmış və müqayisələr aparılmışdır.

GP səthində metalların adsorbsiyasına dair məlum işlərdə əsasən defektsiz (qüsursuz) GP xassələri öyrənilmişdir. Eyni zamanda müxtəlif mübadilə-korrelyasiya funksiyalarından ( $E_{XC}$ ) istifadə edilmişdi. Bununla belə, səth qüsurları elektron, maqnit və mexaniki xassələrə əhəmiyyətli dərəcədə təsir göstərir. Bunu nəzərə alaraq, qrafen səthinin adsorbsiyasını və elektron xassələrini öyrənmək aktualdır. Bu işdə biz “vakansiya + adatom  $Au_{ads}$ ” kompleksləri daxil olmaqla qrafen əsasında strukturların electron xassələrini hesablamışıq.

Bu işin məqsədi qrafen superqəfəslərinin səthində  $Au_{ads}$  adsorbsiya enerjisinin Ab-initio hesablanmasıdır. Biz həm  $GP < Au_{ads} >$ , həm də tərkibində nöqtəvi defektlər saxlayan ( $GP_V < Au_{ads} > V$  - vakansiya) strukturların electron xassələrini hesablamışıq.

Beləliklə, nanoelektronika və spintronika üçün perspektiv olan laylı quruluşlu 2D materialların, o cümlədən qrafenin (GP) xassələrinin kompüter modelləşdirilməsi aparılmışdır. 50 karbon atomlu qrafen əsaslı superqəfəslərinin atom və elektron quruluşları relaksasiya edilmiş və parametrləri təyin edilmişdir. Qrafen səthində “vakansiya + Au adatom” kompleksi olan superqəfəslərin stabil konfigurasiyaları müəyyən edilmişdir. GP-də adatomun və “vakansiya + Au adatom” kompleksinin zona quruluşuna və local maqnit momentinə defektlərin və adatomun təsiri hesablanmışdır. “Vakansiya + adatom” kompleksi iştirakında qrafen əsasında səthdə elektron strukturun dəyişməsi hesablanmış və nəticələrin təhlili aparılmışdır. ( $GP < Au_{ads} >$ ,  $GP_V < Au_{ads} >$  sistemləri üçün tarazlıq atom konfigurasiyası, elektron vəziyyətlərin lokal sıxlığı və spin polarizasiyası nəzərə alınaraq hesablanmış və müqayisələr aparılmışdır.

Modelin və hesablama metodunun seçilib təkmilləşdirilməsi aşağıdakı istinadlarda tərəfimizdən aparılmışdır. Komyüter hesablamaları sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində lokal elektron spin sıxlığını yaxınlaşmasında (LSDA) mübadilə-korrelyasiya funksiyalarından istifadə etməklə aparılmışdır.

$Au_{ads}$  adatomunun adsorbsiya enerjisi aşağıdakı düstur ilə hesablanmışdır

$$E_{ads}^{atom} = \frac{1}{m+n} E_{total}(graphene + Au_{ads}) - [mE_{iso}^C(graphene) + nE_{iso}^{Au}(Au_{ads})] \quad (1)$$

burada  $E_{ads}^{atom}$  - adatomunun qrafen səthi ilə əlaqə (bağlanma) enerjisidir,  $E_{total}(graphene + Au_{ads})$  - adsorbsiya edilmiş adatomlu qrafenin kompleksinin ( $graphene + Au_{ads}$ ) ümumi enerjisidir,  $mE_{iso}^C(graphene)$  - təcrid olunmuş qrafenin ümumi enerjisidir,  $E_{iso}^{Au}(Au_{ads})$  - təcrid olunmuş  $Au_{ads}$  adatomunun ümumi enerjisidir, m və n müvafiq olaraq qrafendəki karbon və adatom atomlarıdır.

$Au_{ads}(111)$  (LDA;  $a = 4.052 \text{ \AA}$ ) adsorbsiyası zamanı qrafen monolayının deformasiyası aşağıdakı düsturla hesablanmışdır:  $\frac{d_{C-C}^{free} - d_{C-C}^{ads}}{d_{C-C}^{free}} \times 100$ , burada  $d_{C-C}^{free}$  və  $d_{C-C}^{ads}$  sərbəst və adsorbsiya edilmiş qrafen monolaylarında C-C əlaqə uzunluqlarıdır.

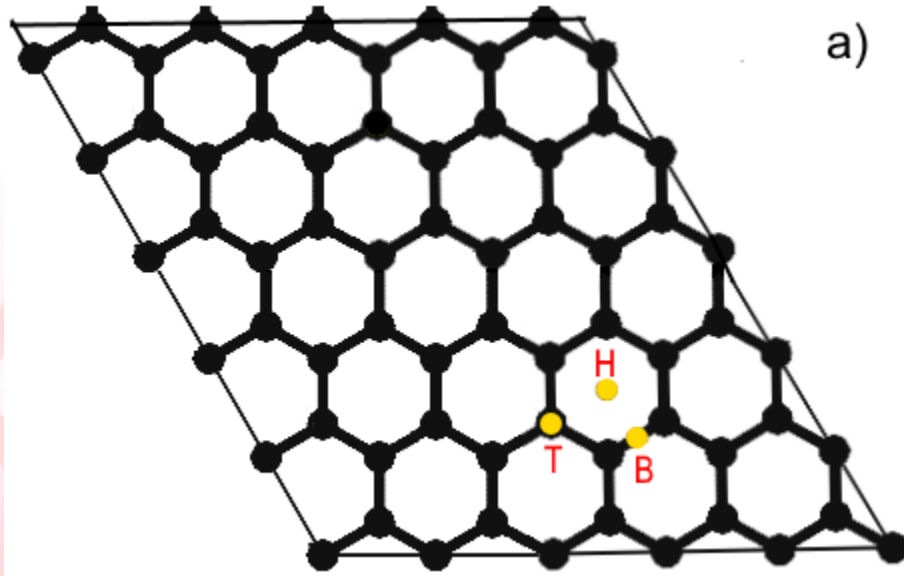
LDA istifadə edərək DFT hesablamalarına görə, təmiz qrafendə C–C əlaqəsinin (bağının) uzunluğu (1.41 Å) ( $GP < Au_{ads} >$ ,  $GP_V < Au_{ads} >$  strukturlarında C–Au əlaqəsinin uzunluğundan azdır.

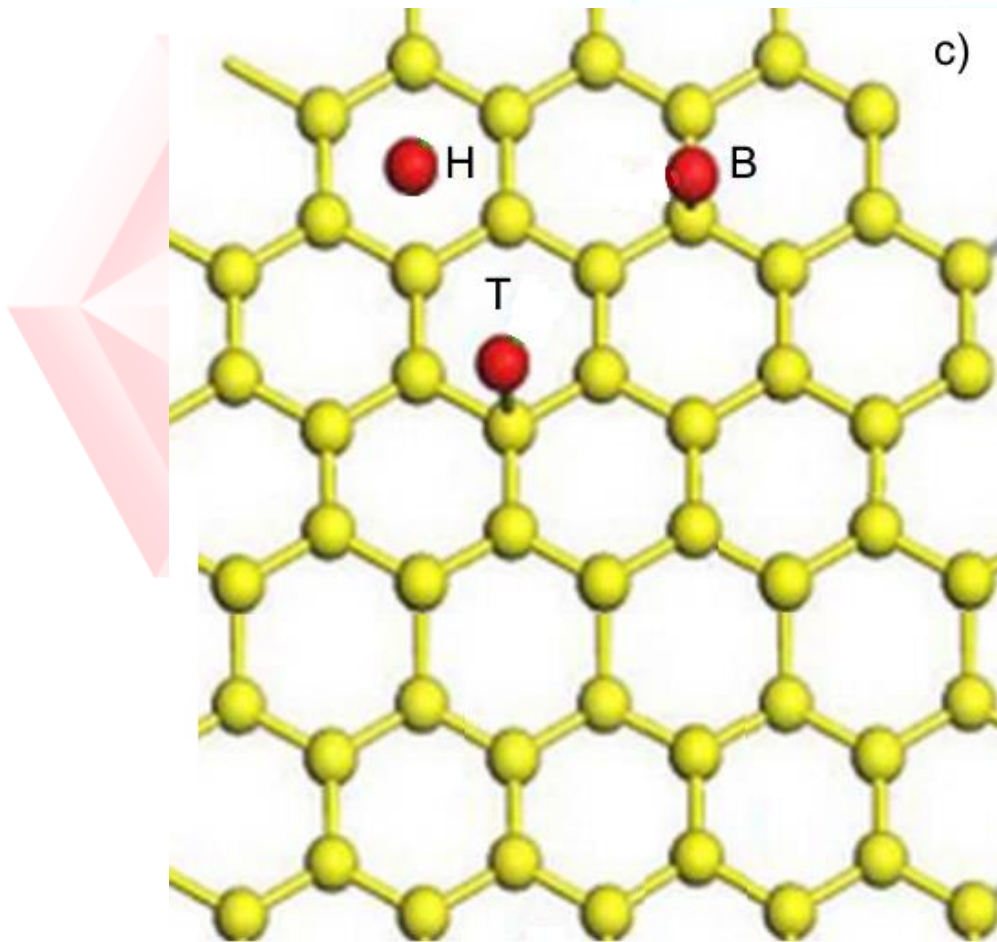
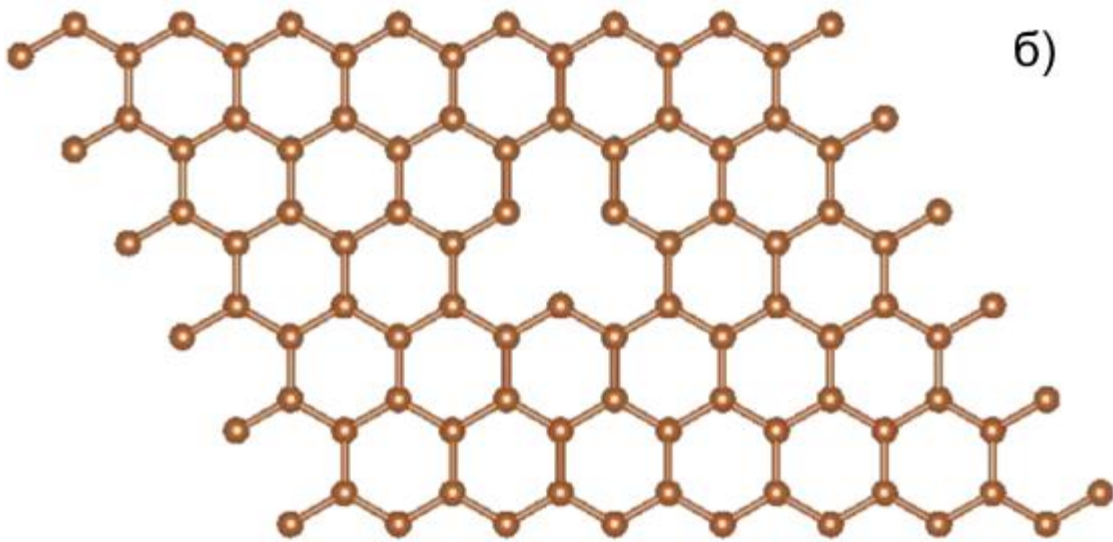
Otaq temperaturunda Au atomu ilə qrafit təbəqəsi arasındakı məsafə  $\lambda = \sim 400 \text{ nm}$ -dir. Fiziki adsorbsiya nəzəriyyəsinə əsasən

$$\lambda = \frac{a}{2} \sqrt{\frac{v_d}{v_{ads}}} \exp\left(\frac{E_{ads}^{atom} - E_d}{2k_B T}\right) \quad (2)$$

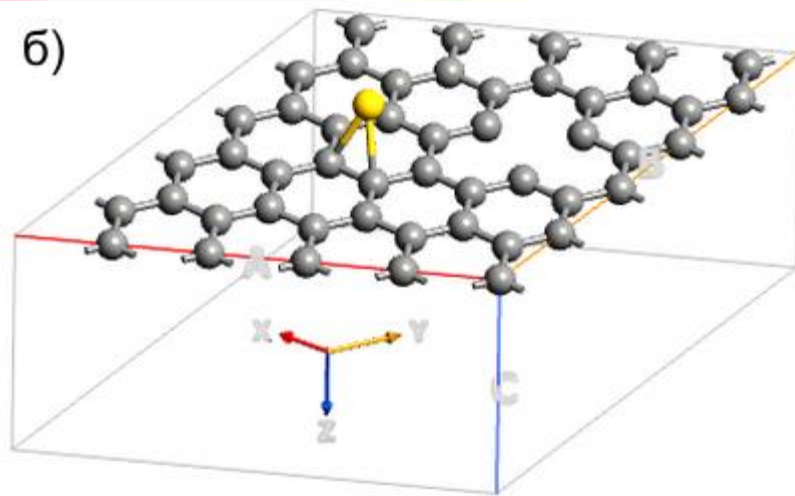
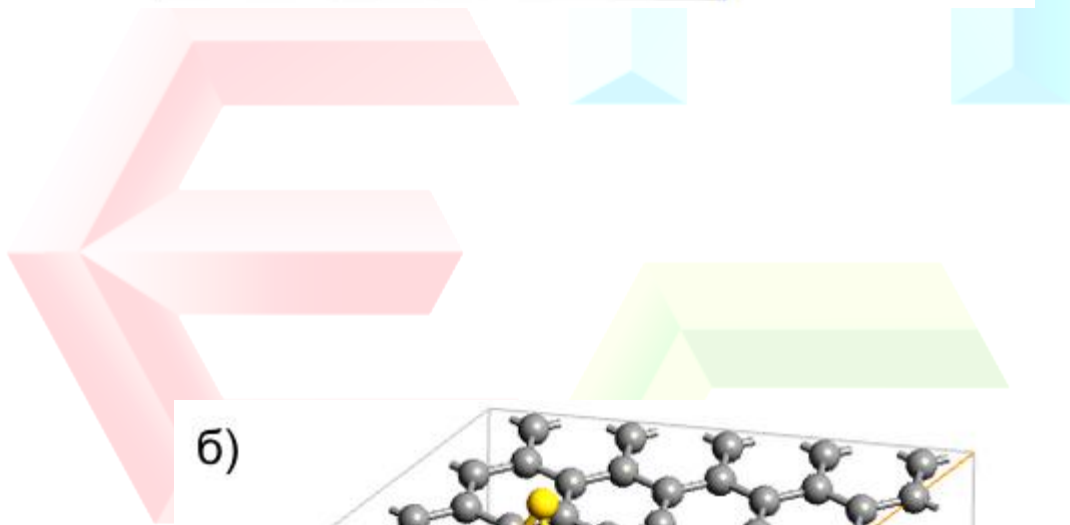
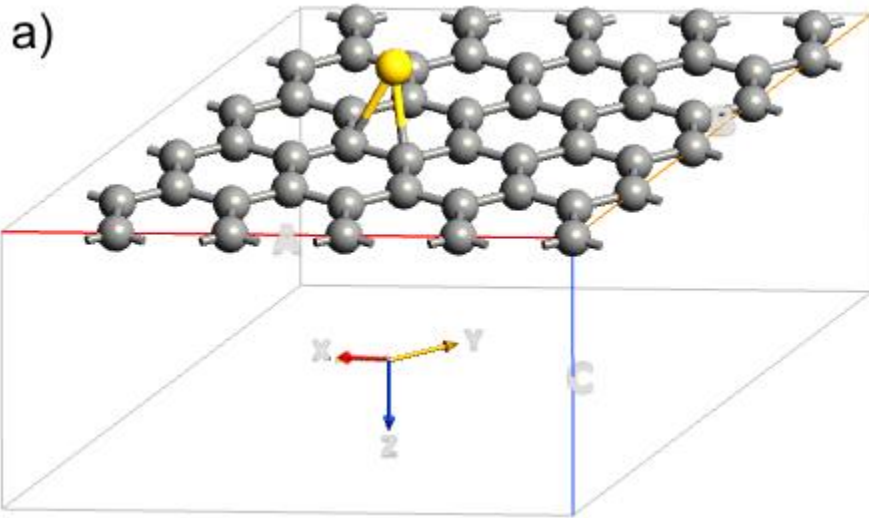
Bunu nəzərə alaraq  $E_{ads}^{atom} - E_d \approx 0,64 - 0,24 = 0,40$  eV əldə edirik.

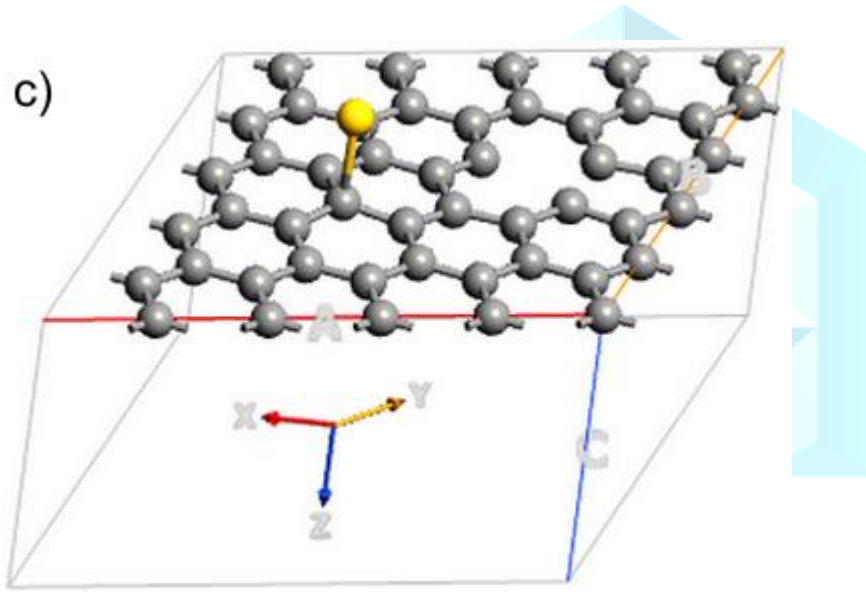
$Au_{ads}$  səthdə yerləşməsinin üç müxtəlif konfigurasiyası (B-sayt, H-sayt və T-sayt) üçün  $GP < Au_{ads} >$  və  $GP_V < Au_{ads} >$  üçün atom strukturları relaksasiya edilmişdir (rahatlaşdırılmışdır). Strukturların rahatlamasından sonra hesablama nəticələri müqayisə edilmişdir. Nəticələr tərkibində 50 karbon atomu olan  $5 \times 5$  ölçülü qrafen superqəfəslərinin hesablanması üçün şəkil 1-4-də və cədvəl 1-də aşağıda verilmişdir.





**Şəkil 1.** Adsorbsiya mərkəzləri  $5 \times 5$  qrafen monolayının superqəfəsi (a,b, c). Vakansiyalı və adatomlu qrafen səthi.

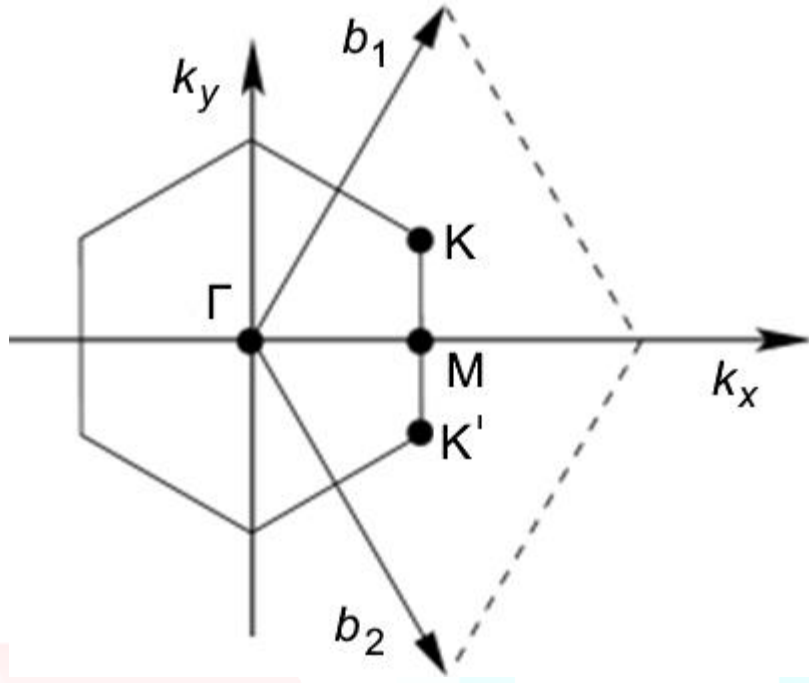




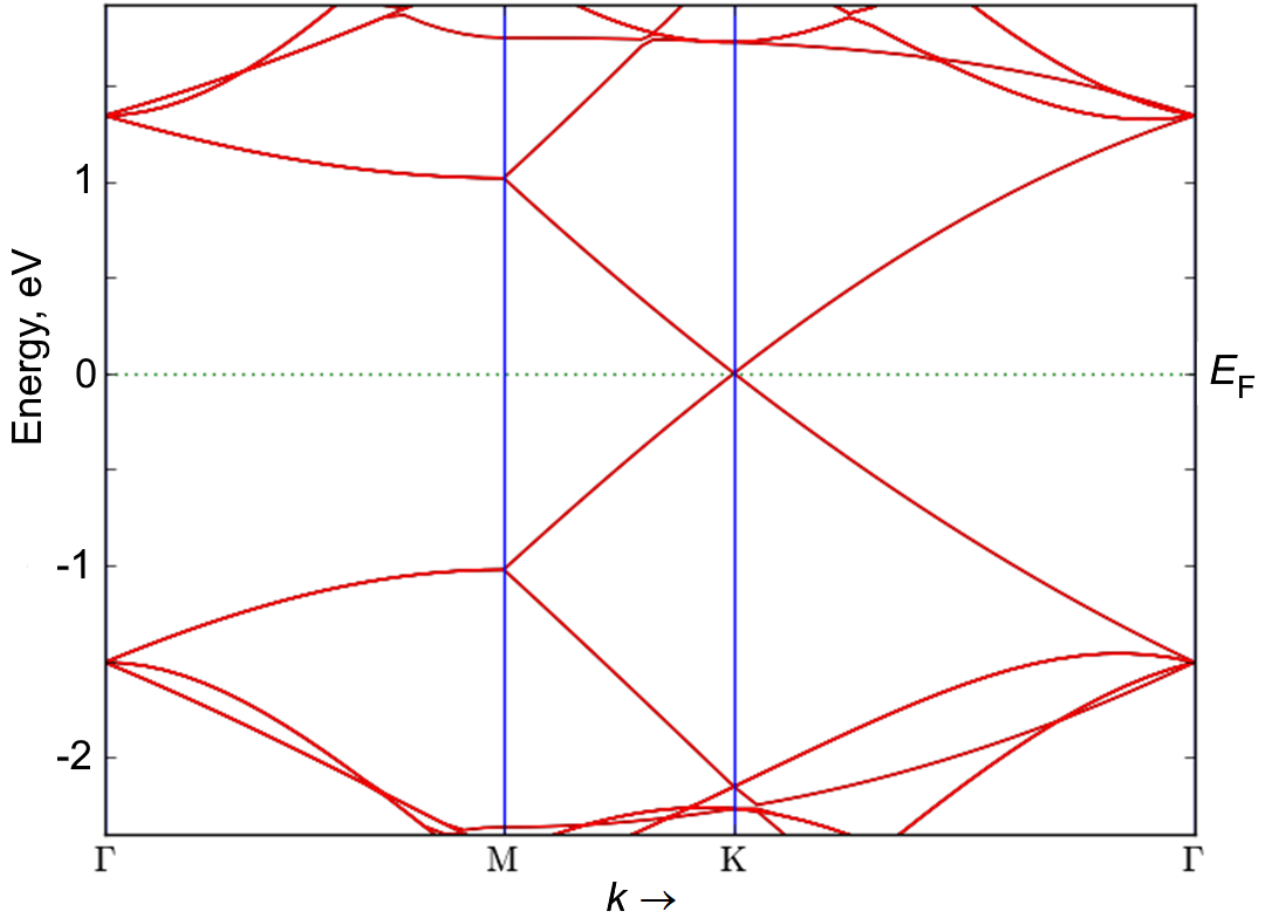
**Şəkil 2.** Tərkibində 50 karbon atomu olan  $5 \times 5$  ölçülü qrafen superqəfəslərinin monoqatında  $Au_{ads}$  adatomunun yerləşməsinin həndəsi modeli:

- a) C-C bağı arasındakı körpü bölməsində (B-sayt) yerləşən  $Au_{ads}$  ilə qrafen superqəfəsi  $GP_V < Au_{ads} >$
- b)  $Au_{ads}$  C-C əlaqə arasındakı "körpü" bölgəsində (B-sayt) yerləşdiyi bir vakansiyaya malik defektli qrafen  $GP_V < Au_{ads} >$  superqəfəsi,
- c) bir vakansiyaya malik qüsurlu qrafen  $GP_V < Au_{ads} >$  superqəfəsi, burada  $Au_{ads}$  karbon atomunun üstündə (T-sayt) yerləşir.

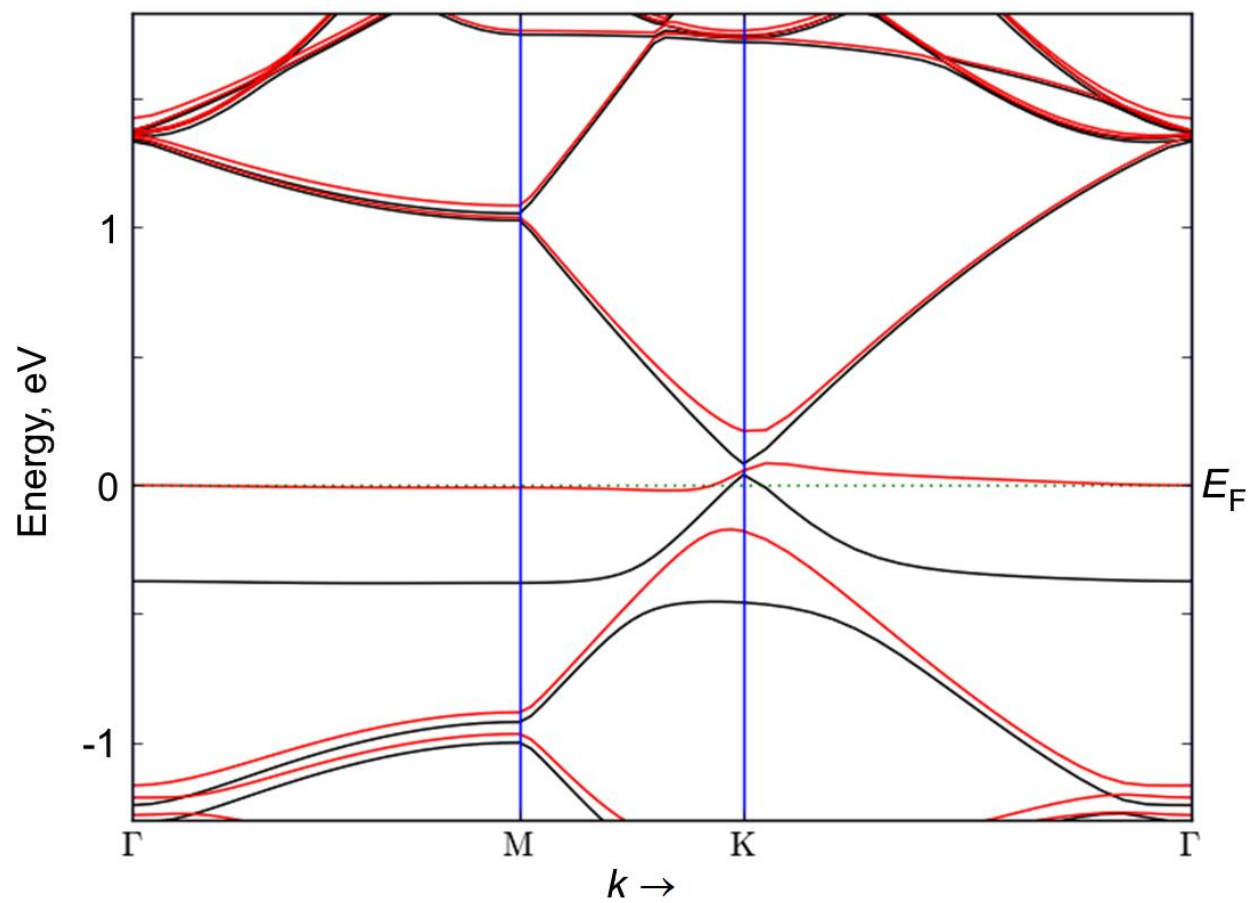




Şəkil 3. Altıbucaqlı Brillouin zonası. K, K' Dirac nöqtələridir.

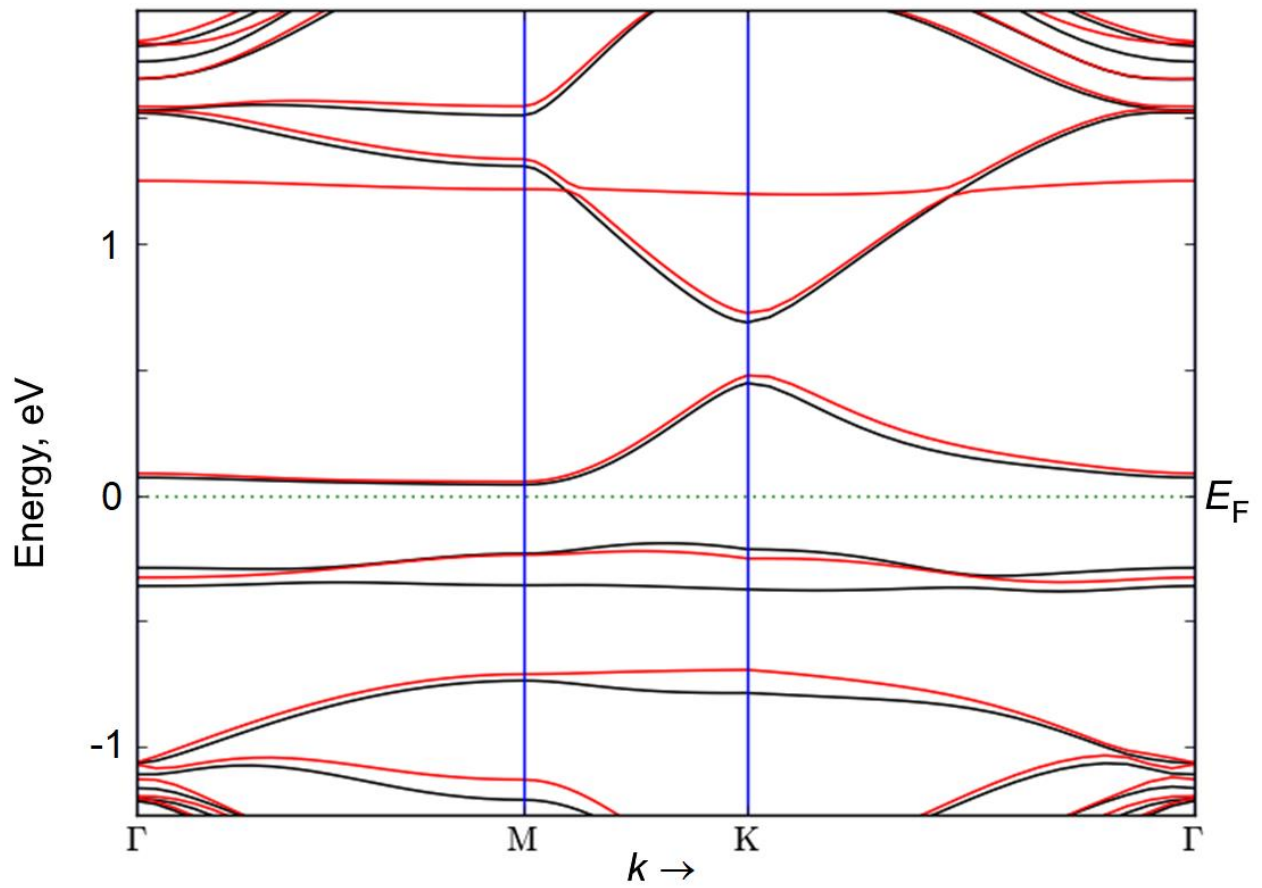


a)



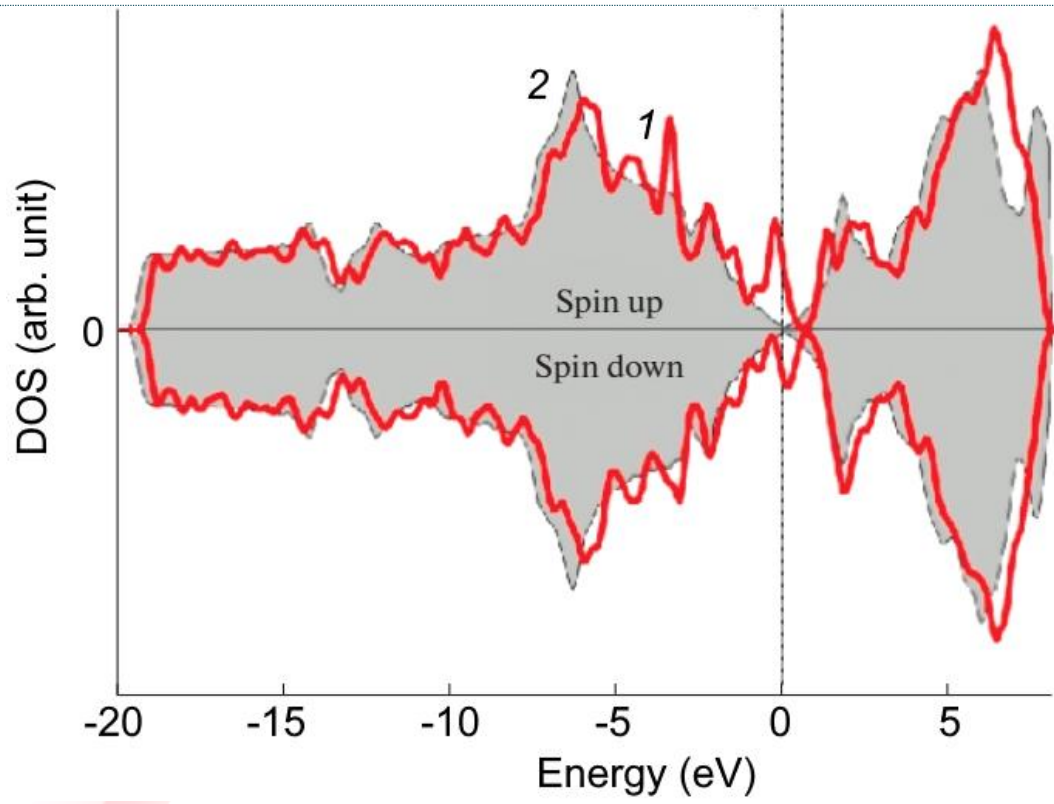
b)





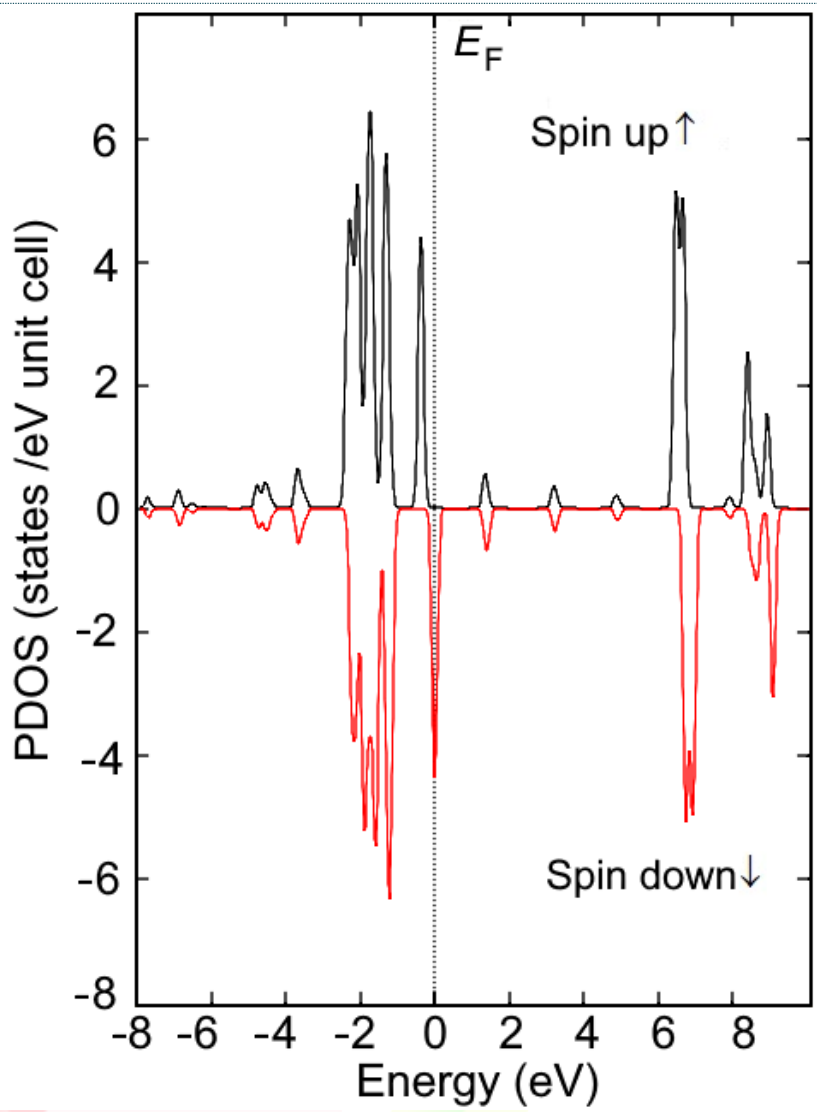
c)

**Şəkil 4.** Adatomlu qrafen əsasında  $5 \times 5$  superqəfəsin hesablanmış elektron zona strukturu. a) təmiz qrafen, b –  $GP < Au_{ads} >$ , c –  $GP_V < Au_{ads} >$ . Fermi səviyyəsi ( $E_F$ ) sıfırdır. Adatom qrafenin səthində T yerində adsorbsiya olunur.

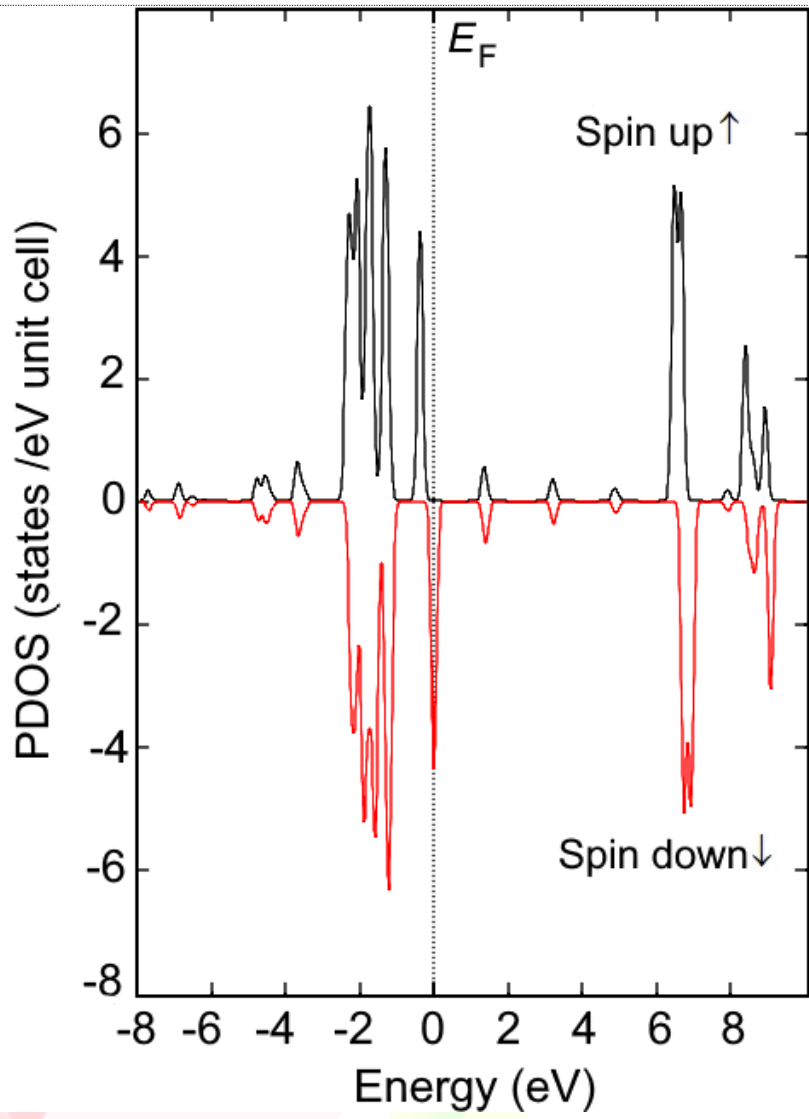


a)





b)



c)

**Şəkil 5.** s-, p-, d-elektronlu  $Au_{ads}$  adatomu olan  $5 \times 5$  qrafen superqəfəslərin hesablanmış ümumi (DOS) və parsial elektron hal sıxlıqları (PDOS): a) qrafen superqəfəslərinin DOS, 1 – “təmiz” qrafen; 2 – monovakansiyalı qrafen, b) PDOS supercell  $GP < Au_{ads} >$  superqəfəslərinin PDOS, c) monovakansiyalı  $GP_V < Au_{ads} >$  superqəfəslərinin PDOS.

**Cədvəl 1.**  $Au_{ads}$  adatomu olan (eV/atom)  $GP < Au_{ads} >$  və  $GP_V < Au_{ads} >$   $5 \times 5$  superqəfəslərin optimallaşdırılmış səthlərində adsorbsiya enerjilərini və Au-C atomları arasında tarazlıq orta məsafəsinin ( $d_{eq}$ ) DFT LSDA üsulu ilə hesablanmış qiymətləri. LSDA məlumatları  $Au_{ads}$  adatomunun səthin yuxarı hissəsində (T-sayt) yerləşdiyi Au-C əlaqə sahəsi üçün göstərilir.

$E_{XC}$ funksional	$E_{ads}^T$ , eV/atom	$d_{eq}^T$ , Å
LSDA	$GP < Au_{ads} >$	2.56
	-0.41	
LSDA	$GP_V < Au_{ads} >$	2.21
	-3.36	

**Cədvəl 2.** DFT LSDA üsulu ilə hesablanmış  $GP < Au_{ads} >$  və  $GP_V < Au_{ads} >$   $5 \times 5$  superqəfəslərin  $Au_{ads}$  adatomunun qrafen səthindəki mövqeyi ( $h_a$ ), "bağlanmış" karbon atomundan C ( $d_{eq}^T$ )  $Au_{ads}$ -ə olan orta məsafə və adatomunun ümumi maqnitləşməsi ( $m_{cell}$ ).

$E_{XC}$ funksional	$h_a$ (Å)	$d_{eq}^T$ (Å)	$m_{cell}$ ( $\mu_B$ )
$GP < Au_{ads} >$	2.59	2.48	0.91 [4]
$GP < Au_{ads} >$	3.10	2.56	0.80
$GP_V < Au_{ads} >$	2.75	2.21	1.01

[4] Srivastava M.K., Wang Y., Kemper A.F., Cheng H.-P. Density functional study of gold and iron clusters on perfect and defected graphene // Physical Review B. 2012. V. 85. № 16. P. 165444-13. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.165444>

### 3. Nəticələr

Qızıl atomlarının qrafenin defektli səthinə adsorbsiyasının modelləşdirilməsinin əsas nəticələri aşağıdakılardır.

$GP < Au_{ads} >$  və monovakansiyalı  $GP_V < Au_{ads} >$   $5 \times 5$  superqəfəslərinin lokal spin sıxlığı yaxınlaşmasından (LSDA) istifadə edərək sıxlığın funksional nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində hesablamaları aşağıdakıları göstərir. Qrafenin superqəfəslərinin monolay səthində karbon atomunun yuxarı hissəsində adsorbsiya edilmiş qızıl atomlarının  $Au_{ads}$  (səthdə tetraedral konfigurasiya; T sahəsi) yerləşməsi, C-C əlaqəli (B sahəsi) və boşluqlar arasındakı körpü bölgələrinə (H sahəsi) nisbətən, hesablanmış adsorbsiya enerjisinin qiymətləri göstərir ki, enerji baxımından T sahəsi daha sərfəlidir. Qrafen səthində karbon vakansiyalarının əmələ gəlməsi enerjisinin hesablanmış qiymətləri ( $E_f^{SV} = 7.46$  eV) qrafen əsaslı materiallarda elektronların köçürülməsi xassələri üçün vacib parametrdir.  $GP <$

$Au_{ads} >$  və  $GP_V < Au_{ads} >$  adsorbsiya komplekslərində zona quruluşu və hallar sıxlığının hesablanması göstərir ki, bu komplekslərdə yük daşıyıcıları lokallaşdır və onların hərəkəti yüklərin diffuziyasında əhatə edir.

Qrafen superqəfəslərində qızıl atomunun ( $Au_{ads}$ ) adsorbsiyasının LDA ilə hesablanmış adsorbsiya enerjiləri ( $E_{ads}^T$ ) nisbətən aşağıdır və metalları üçün xarakterikdir. Spin polarizasiyasının hesablamada nəzərə alınması bu qrafen əsaslı strukturların  $Au_{ads}$  adsorbsiya enerjisinin qiymətlərini düzəltməyə imkan verir. Adsorbsiya enerjilərinin  $E_{ads}^T$  LSDA üsulu ilə hesablanmış qiymətləri, spin korreksiyasını nəzərə alanda, LDA ilə hesablanmış  $E_{ads}^T$ -dən orta hesabla 0.34 eV yüksəkdir.  $GP_V < Au_{ads} >$  strukturunun  $Au_{ads}$ -in adsorbsiya enerjisi  $E_{ads}^T$ , defektsiz  $GP < Au_{ads} >$   $E_{ads}^T$ -dən aşağıdır.  $GP < Au_{ads} >$  və  $GP_V < Au_{ads} >$ -da adsorbsiya enerjisi səthin qüsursuzluğundan (defektlərdən) asılıdır və səthin defektliyi azaldıqca  $E_{ads}^T$  azalır.

LSDA üsulu ilə  $5 \times 5$  qrafen  $GP < Au_{ads} >$  və  $GP_V < Au_{ads} >$  superqəfəsləri üçün hesablanmış lokal maqnit momentləri ( $\mu_B$ ) bir-birindən fərqlənir. Spin-orbital qarşılıqlı təsirini və Au-nun f-atom vəziyyətlərinin parçalanmasını nəzərə alaraq,  $GP < Au_{ads} >$  superqəfəslərinin hesablanmış ümumi maqnit momenti  $0.8 \mu_B$ -dir.  $GP_V < Au_{ads} >$  superqəfəsdə ümumi lokal maqnit momentinin qiyməti artır və  $1.01 \mu_B$  təşkil edir.  $GP_V < Au_{ads} >$  superqəfəsdə vakansiya yaxınlığındakı maqnit momenti karbon vakansiyasının səthdəki yerindən asılıdır. Səthdə, məsələn, C50 və C25 atomları yaxınlığında parsial lokal maqnit momentinin qiyməti müvafiq olaraq  $0.83$  və  $0.65 \mu_B$ -dir.

#### 4 Layihənin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə olunan üsul və yanaşmalar

*(burada doldurmalı)*

Fiziki xassələrin ölçülməsi üsulu, nanomodellərin hazırlanması, elektron quruluşunun qeyri-empirik hesablanması üsulları, funksional sıxlıq nəzəriyyəsi, lokal sıxlıq yaxınlaşması (LDA), lokal spin sıxlıq yaxınlaşması (LSDA), kvant-kimyəvi hesablamalar.

#### 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)*

Xaricdə (İmpakt-faktorlu jurnalda) layihənin 1, 2 və 3-cü mərhələ üzrə bir məqalə, yeni ümumilikdə 3 məqalə dərc edilib

1. Asadov M.M., Mustafayeva S.N., Guseinova S.S., Lukichev V.F., Tagiev D.B. Modeling structural and energy characteristics of atoms in a GaS 2D-crystal with point defects // *Physics of the Solid State*. 2022. Vol. 64. No. 1. P. 44–57. <https://doi.org/10.21883/FTT.2022.01.51830.182>  
<http://journals.ioffe.ru/issues/83> (1-ci mərhələ)

2. Asadov M.M., Mustafayeva S.N., Huseynova S.S., Lukichev V.F. DFT Electronic Structure Simulation and Adsorption of Ge in Ordered Graphene with a Vacancy // *Russian Microelectronics*, 2022. Vol. 51. No. 2. P. 103–116. <https://doi.org/10.1134/S1063739722010024> (2-ci mərhələ)

3 Asadov M.M., Mammadova S.O., Guseinova S.S., Mustafayeva S.N., Lukichev V.F. Ab initio modeling of gold adsorption by the surface of defect graphene // *Russian Microelectronics*. 2022. Vol. 51. No. 6. P. 384–396. <https://doi.org/10.1134/S1063739722700159> (çapdadır) (3-cü mərhələ)



6	İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər (burada doldurulmalı) Yox
7	Layihə üzrə ezamiyyətlər (burada doldurulmalı) Yox
8	Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak (burada doldurulmalı) Yox
9	Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak (burada doldurulmalı) Yox
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) Layihə üzrə yerli həmkarlarla cari ildə 3 məqalə dərc edilib 1) <a href="https://doi.org/10.21883/FTT.2022.01.51830.182">https://doi.org/10.21883/FTT.2022.01.51830.182</a> 2) <a href="https://doi.org/10.1134/S1063739722010024">https://doi.org/10.1134/S1063739722010024</a> 3) <a href="https://doi.org/10.1134/S1063739722700159">https://doi.org/10.1134/S1063739722700159</a>
13	Xarici həmkarlarla əlaqələr (burada doldurulmalı) Layihə üzrə xarici həmkarlarla cari ildə 3 məqalə dərc edilib 1) <a href="https://doi.org/10.21883/FTT.2022.01.51830.182">https://doi.org/10.21883/FTT.2022.01.51830.182</a> 2) <a href="https://doi.org/10.1134/S1063739722010024">https://doi.org/10.1134/S1063739722010024</a> 3) <a href="https://doi.org/10.1134/S1063739722700159">https://doi.org/10.1134/S1063739722700159</a>
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 doldurmalı)

Yox

Layihə rəhbərinin imzası \_\_\_\_\_ Əsədova Solmaz Nəriman qızı

Tarix \_\_\_\_\_

QEYD: bütün hallarda uyğun olan bəndlər doldurulmalıdır.

