



## 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

### 1 İLLİK 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 – sentyabr 2023-cü il**

Layihənin 1 il üzrə (rüb) məbləği: :

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

<b>1</b>	<p>Layihənin həyata keçirilməsi üzrə cari rübdə yerinə yetirilmiş <b>elmi işlər</b> (burada doldurmalı)</p> <p>Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində altıbucaqlı quruluşa malik olan yarımkeçirici qallium monosulfidin (GaS) elektron xassələri xüsusi nöqtəvi defektlərin (vakansiyalar) təsiri nəzərə alınmaqla modelləşdirilmişdir.</p> <p>Tərkibində elementar yarımkeçirici atomlar saxlayan qrafen (GP) superqəfəslərinin elektron xassələri modelləşdirilmişdir. 16 və 54 karbon atomlu Ge və Si dopinq edilmiş qrafen super qəfəslərinin elektron və energetik zona quruluşları sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində təməl prinsiplərindən hesablanmışdır. Qrafen monolaylarına Ge və Si dopinq edilməsi, qrafenin qadağan olunmuş zonasının (<math>E_g</math>) əmələgəlməsinə (açılmasına) səbəb olur. Vakansiyasız Ge-dopinq edilmiş qrafendə qadağan olunmuş zonanın eni <math>E_g = 0.505</math> eV-dir. Qrafendə bir vakansiya nəzərə alındıqda qadağan olunmuş zolağın eni <math>E_g = 0.21</math> eV qədər azalır.</p> <p>Qrafenin (GP) <math>5 \times 5</math> superqəfəsləri formalaşdırılmış və GP-nin səthində hesablamalar aparılmışdır. Qızıl atomlarının qrafenin (GP) səthinə adsorbsiyasının modelləşdirilməsi aparılmışdır.</p> <p><math>GP &lt; Au_{ads} &gt;</math> və monovakansiyalı <math>GP_V &lt; Au_{ads} &gt;</math> <math>5 \times 5</math> superqəfəslərinin lokal spin sıxlığı yaxınlaşmasından (LSDA) istifadə edilmişdir. Elektron sıxlığının funksionalı nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində hesablamalar aşağıdakıları müəyyən etməyə imkan vermişdir.</p> <p>Qrafenin superqəfəslərinin səthində verilmiş karbon atomunun yaxınlığındakı hissədə adsorbsiya</p>
----------	--

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.

**Cari rübdə.** Spin qütbləşməsi (LSDA) nəzərə alınmaqla elektron sıxlığı funksionalı nəzəriyyəsinə (DFT) əsaslanaraq, biz Li-ion batareyası üçün anod materialı kimi monovakansiyaya (GP\_V) malik qrafen (GP) monolayında litium atomunun adsorbsiya və diffuziya xassələrini hesablamışq. DFT LSDA hesablamaları relaksasiya edilmiş  $5 \times 5$  və  $6 \times 6$  superqəfəslərində GP-Li\_ads-də və monovakansiya + litium adatom kompleksi GP\_V-Li\_ads ilə qrafen əsasında aparılmışdır.  $E_{ads}^{Li}$  litium atomunun adsorbsiya enerjisinin hesablanmış qiymətlərinə əsasən, GP-Li\_ads və GP\_V-Li\_ads-də superqəfəslərin monolayında litium adatom Li\_ads-in enerji baxımından sabit yeri müəyyən edilmişdir. Hesablama nəticələri göstərir ki, Li\_ads adatom enerji cəhətdən monolayda karbon atomunun yuxarı hissəsində (T-sahəsi) və ya körpücük vəziyyətlərində (B-sahəsi) adsorbsiya olunmaqdan, çuxur vəziyyətində (H-sahəsi) adsorbsiya olunmağa üstünlük verir.

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)

1. GİRİŞ. Kiçik və yüngül olması lazım olan litium-ion batareyalarında (LIB) xüsusilə anod materialı kimi qrafitdən istifadə edilir. Qrafitin strukturunda 372 mAh/q xüsusi tutumu olan altı karbon atomuna bir litium atomu ( $LiC_6$ ) düşür [1-3]. Bununla belə, qrafit tərkibli materialların qrafitin yüksək müqaviməti, aşağı əməliyyat cərəyanı sıxlığı və xüsusi tutumluluğu, qısamüddətli dövrü sabitlik, aşağı məhsuldarlıq və təhlükəsizlik kimi çatışmazlıqları var.

Tək qatlı qrafen (600-1000 mAh/g) və onun kompozitləri qrafitlə müqayisədə LIB üçün digər laylı anod materiallarından istifadə imkanlarını genişləndirmişdir. Buna görə də qrafit tərkibinin modifikasiyası və alternativ anod materiallarının axtarışı aktual məsələdir. Bu baxımdan, ikiölçülü (2D) materiallar, o cümlədən qrafen (GP) əsaslı materiallar perspektivlidir ki, bu da LIB-də güc və enerji sıxlığını artırmağa imkan verəcəkdir.

GP, atomların iki ölçülü təbəqələr yaratmaq üçün kovalent şəkildə bağlandığı laylı bir quruluşa malikdir, bu da öz növbəsində van der Waals qarşılıqlı təsirləri ilə bir-birinə bağlıdır. Bu zəif təbəqələrarası (interlayer) bağlanma xarici ionların və ya molekulların həcmdə əhəmiyyətli dəyişikliklərə səbəb olmadan interkalasiya yolu ilə interlayerlərə daxil olmasına imkan verir. Beləliklə, GP yüksək enerji sıxlığına (~600 mAh/g) malik LIB-lər üçün anod materialı kimi perspektivli ola bilər.

Qrafit kimi "pətək" quruluşlu karbon atomlarından ibarət olan qrafen yüksək elektrik keçiriciliyinə, geniş səth sahəsinə malikdir və yüksək cərəyan sıxlığına tab gətirə bilər. Davamlı qrafen materialının yük daşıyıcılarının mütəhərrikliliyi də yüksəkdir. Bundan əlavə, LIB çox sayda işləmə dövrü ərzində stabil işləməlidir. Buna görə də nanostrukturlu GP LIB anodu kimi diqqəti cəlb edir və ilkin nəticələr onun həcmi quruluşlu qrafenlə müqayisədə daha yüksək xüsusi tutuma malik olduğunu göstərib. Başqa sözlə, LIB-də anod materialının bir hissəsi kimi qrafenin istifadəsi materialın yuxarıdakı çatışmazlıqlarını aradan qaldırmağın yollarından biridir [4-6].

2D GP monolayer müxtəlif üsullarla sintez olunur. GP-nin sintezi və istehsalı zamanı materialın fiziki, kimyəvi və elektrik xassələrinə təsir edən defektlər əmələ gəlir. Müxtəlif qatqılı metalların, xüsusi nöqtəvi defektlərin (o cümlədən müxtəlif vakansiyalar və antidüynü defektlər) və sərhəd dənələrinin GP monolayerinin elektron və maqnit xüsusiyyətlərinə təsiri öyrənilir.

LIB performansını anod və katod materiallarının elektrokimyəvi xüsusiyyətlərindən asılıdır. Elektrod materialının kimyəvi tərkibi redoks reaksiyaları zamanı tutum və işləmə gərginliyini və materiallarda litiumun maksimum konsentrasiyasını müəyyən edir. Elektrod materiallarının elektron xüsusiyyətləri və yüksək ion hərəkətliliyi LIB-nin işləmə sürətini və dövretməsinə müəyyən edir. GP-Li əsasında anod materialında litiumun adsorbsiya [4, 5] və diffuziya [6, 7] xüsusiyyətləri tədqiq edilmişdir.

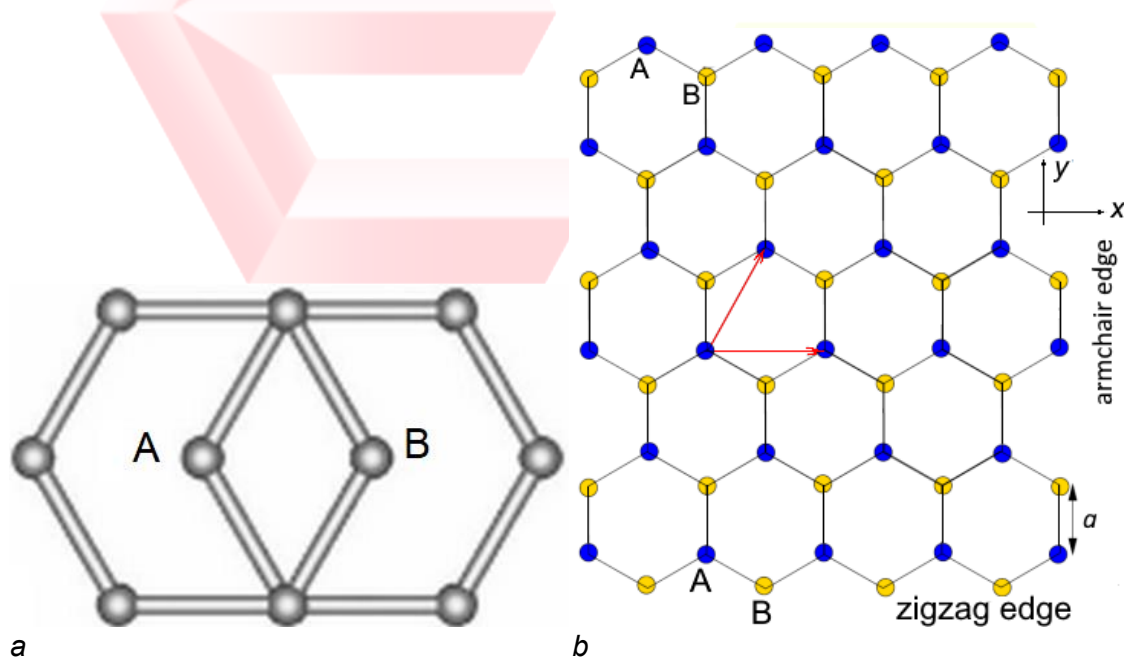
GP-də Li ionunun diffuziya baryeri (maneəsi) LIB anod materialının yüksək yüklənmə sürətini təmin etmək üçün kiçik olmalıdır. Eyni zamanda, anod materialının böyük enerji saxlama qabiliyyətinə malik olması üçün GP litium ilə böyük ekzotermik reaksiya enerjisinə malik olmalıdır. Nəzəri tədqiqatlar göstərdi ki, Li aşağı diffuziya maneəsi olan GP monolayerində sabit şəkildə adsorbsiya oluna bilər. Bununla belə, GP monolaylarının daxili nöqtəvi defektlərin və dənəli sərhədlərinin Li-nin adsorbsiyasına və diffuziyasına təsiri kifayət qədər öyrənilməmişdir.

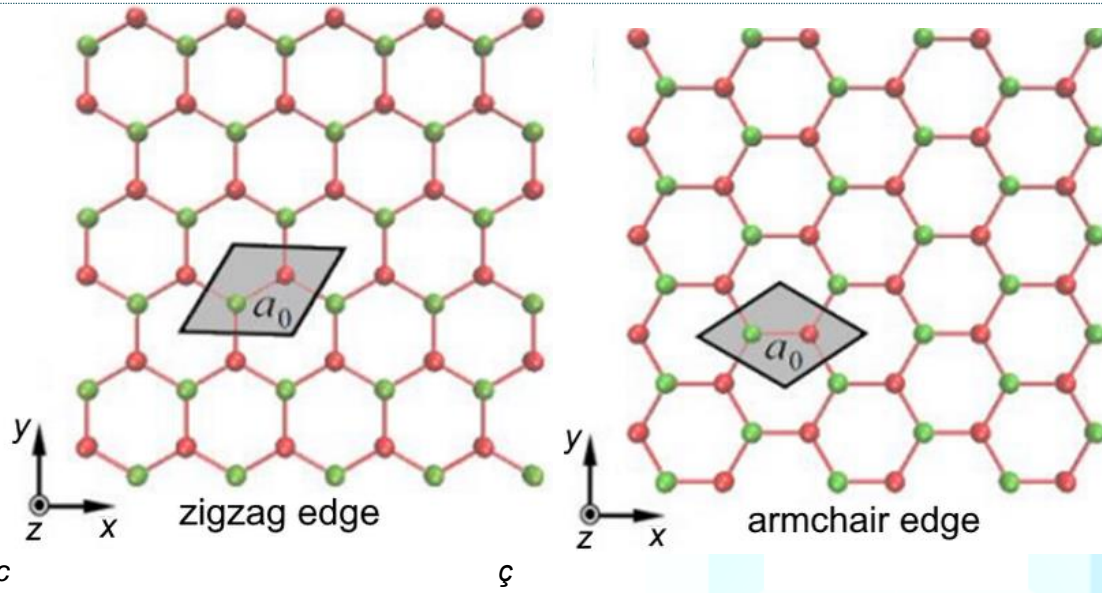
Bundan əlavə, müxtəlif işlərdə əldə edilmiş GP\_V-Li-də adsorbsiya xüsusiyyətləri arasında ziddiyyət mövcuddur [4-6]. GP-Li-də litiumun diffuziya  $D_{Li}$  qiymətləri də fərqlidir:  $4,4 \times 10^{-6} \text{ sm}^2 \text{ s}^{-1}$  [5] və  $7 \times 10^{-5} \text{ sm}^2 \text{ s}^{-1}$  [6]. Bu ziddiyyətlər və elektrod materialları üçün qrafen sistemlərinə olan maraq [7] qrafendə litiumun udulması və yayılmasının sistemə tədqiqinə təkan verir.

Bu işin məqsədi sıxlıq funksional nəzəriyyəsi (DFT LSDA) əsasında litium atomlarının (adatom  $Li_{ads}$ ) monovakansiya ilə qrafenin səthində adsorbsiyasını hesablamaqdır  $[(GP)_V]$ , həmçinin GP-Li və GP\_V-Li superqəfəslərində litiumun elektron və diffuziya xüsusiyyətlərini tədqiq etməkdir.

Litiumun qrafenlə bağlanması zəifdirsə, GP-Li-də litium atomlarının qruplaşması ehtimalı azalır. Bu, GP-Li-də sistemdə Li-nin diffuziyasını azaldır. Li-nin qrafen müstəvisi ilə yayılması üçün [4]-ə uyğun olaraq hesablanmış enerji maneəsi 10 eV-dir. Defektli (qüsurlu) qrafen GP\_V-də Li-nin diffuziyası (V monovakansiya) litiumun diffuziya və yığılma sürətini artırır. Qrafenin GP\_V monovakansiyaları (8,18 eV) və divakansiyaları (1,34 eV) vasitəsilə Li-nin yayılması üçün enerji maneələri təmiz qrafenlə müqayisədə daha aşağıdır. Qüsurlu qrafen vasitəsilə Li-nin eninə (GP kristalının  $\perp c$  oxu) diffuziyasının enerji maneəsi keçid (GP kristalının  $\parallel c$  oxu) diffuziyasının maneəsindən daha yüksəkdir.

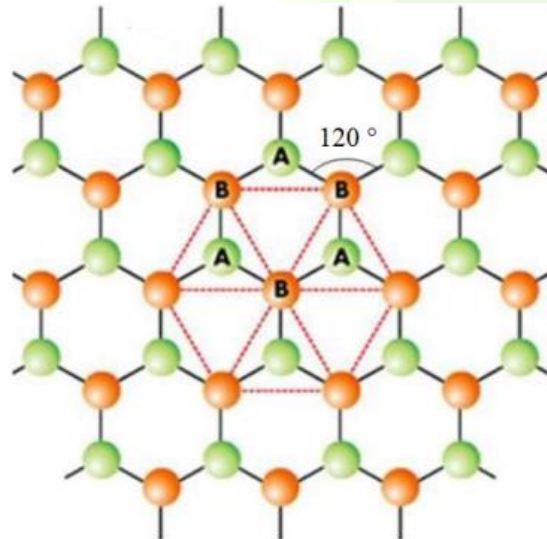
Qrafendə karbon atomlarının struktur yığılması (şəkil 1 a, b, c, d) potensial maneənin hündürlüyünə, xüsusən də iki qatlı qrafenin (BLGP) daxilində təsir göstərir. Li atomları BLGP daxilində interkalasiya edildikdə, karbon qəfəsindəki Li atomları elektronları verir və Li ionlarına çevrilirlər. Litium konsentrasiyası  $x < 0,7$  ( $Li_xC_{12}$ ) olan BLGP AB qablaşdırmasında litium diffuziya əmsalı  $D_{Li}$  263-333 K [7] aralığında tədqiq edilmişdir. Xüsusilə, 300 K-də  $D_{Li}$ -nin dəyəri Li konsentrasiyası  $0,15 < x < 0,61$  olan BLGP üçün  $(0,3-1,0) \times 10^{-4} \text{ sm}^2 \text{ s}^{-1}$ -dir.





Şəkil 1. Qrafen (GP) strukturunda karbon atomlarının altıbucaqlı AB qablaşdırılması,  $a$  – iki ekvivalent alt qəfəs A və B ilə GP qəfəsindəki AB-qablaşdırma,  $b$  – Ziqzaq kənarları (c) və "kreslo" kənarları olan GP atom quruluşu (q).

2. MODEL VƏ HESABLAMA ÜSULU. GP qrafenin monolaylı strukturunun otaq temperaturunda altıbucaqlı strukturda kristallaşdığı məlumdur. Bu halda, qəfəsdəki karbon atomları altıbucaqlılarda ("pətək" tipli quruluş) yığılır. Ən yaxın GP atomları arasındakı məsafə  $a_0 = 0,142$  nm-dir (şəkil 1). GP-nin 2D kristal qəfəsi aşağıdakı qəfəs sabitinə malikdir:  $a = \sqrt{3}a_0$ , burada  $a=b=0,246-0,261$  nm,  $c=0,608$  nm,  $\alpha=\beta=90^\circ$ ,  $\gamma=120^\circ$ . GP-nin vahid (elementar) qəfəsi (hüceyrəsi) iki karbon atomunu (A və B) ehtiva edən bir rombdur. Elementar qəfəsin translyasiyalarının vektorları ilə yerdəyişdikdə, hər bir karbon atomu C ekvivalent C atomlarından ibarət A və B alt qəfəsini əmələ gətirir (şəkil 2).

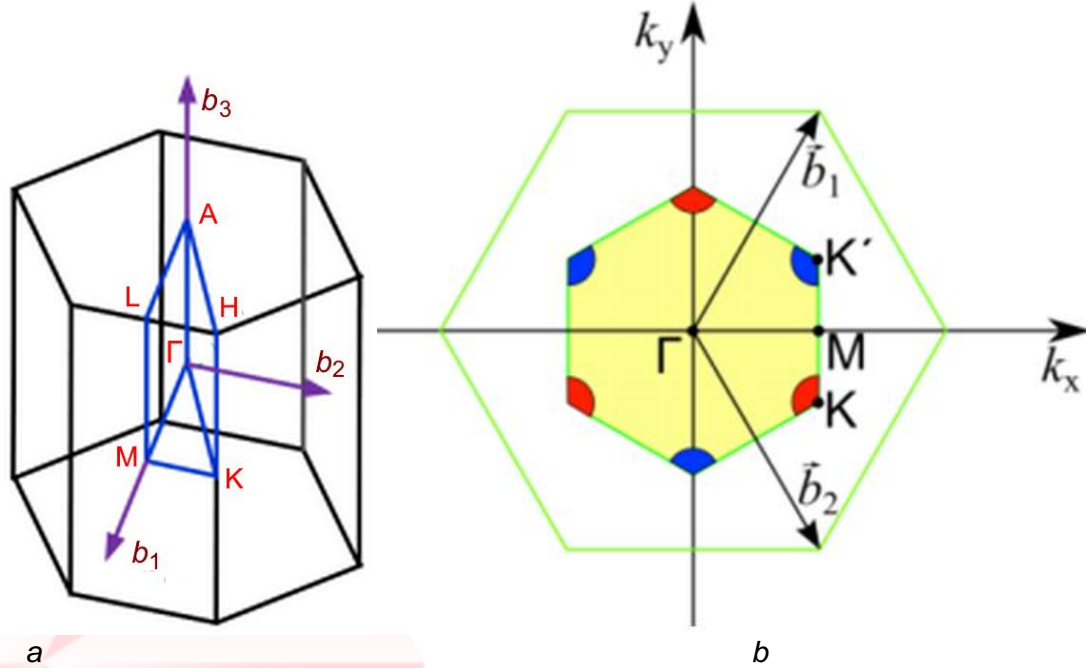


Şəkil 2. Ekvivalent A və B alt qəfələri olan qrafenin kristal qəfəsi.

Sıxıq funksional nəzəriyyəsi (DFT LSDA) əsasında  $5 \times 5$  və  $6 \times 6$  supqəfəsli GP-Li<sub>ads</sub> və GP\_V-Li<sub>ads</sub> qrafenin elektron strukturunun hesablamaları aparılmışdır. 50-dən çox karbon atomundan ibarət superqəfələri tədqiq edilmişdir. DFT hesablamaları Atomistix Toolkit proqram paketindən istifadə edərək  $T = 0$  K-də həyata keçirilmişdir [8-10]. Qarşılıqlı təsir göstərən hissəciklərin mübadilə-

korrelyasiya enerjisi Perdue-Zunger parametrləşdirməsində yerli spin sıxlığı yaxınlaşmasında (LSDA) hesablanmışdır [11]. Qrafendə atom spin-orbit qarşılıqlı təsirinin dəyəri 1  $\mu\text{eV}$  ilə 200  $\mu\text{eV}$  arasında dəyişir [12].

Müntəzəm altıbucaqlı formasına malik olan qarşılıqlı fəzada qrafenin ilk Brillouin zonasını tədqiq etdik. GP (şəkil 3 a, b) əsasında ölçüləri  $5 \times 5$  və  $6 \times 6$  olan superqəfəslərin (superhüceyrələrin) yüksək simmetriya nöqtələri ilə Brillouin zonası üzərində inteqrallaşdırılması Monkhorst-Pack k-nöqtəsi sxemine uyğun olaraq həyata keçirilmişdir [13].



Şəkil 3. Altıbucaqlı strukturun yüksək simmetriya nöqtələri olan birinci Brillouin zonası. Burada  $\Gamma$  simvolları Brilyuen zonasının mərkəzidir; A altıbucaqlı üzün mərkəzidir; H künc nöqtəsidir; K iki düzbucaqlı üzü birləşdirən kənarın ortasıdır; L altıbucaqlı və düzbucaqlı üzləri birləşdirən kənarın ortasıdır; M düzbucaqlı üzün mərkəzidir,  $b_1, b_2$  qrafendə qarşılıqlı qəfəs vektorlarıdır (a). Yükdaşıyıcıların dispersiya qanununun xətti olduğu sahələr, altıbucaqlının (birinci Brillouin zonası) kənarlarındakı sahələrdir (b).

Cədvəl 1-də altıbucaqlı qəfəsin (şəbəkənin) birinci Brillouin zonasının məlumatları göstərilir.

Cədvəl 1. Altıbucaqlı şəbəkənin birinci Brillouin zonasının məlumatları

Точки симметрии	$[k_x, k_y, k_z]$	Точечная группа
$\Gamma: (0, 0, 0)$	$[0, 0, 0]$	6/mmm
A: $(0, 0, 1/2)$	$[0, 0, \pi/c]$	6/mmm
K: $(2/3, 1/3, 0)$	$[4\pi/3a, 0, 0]$	$\bar{6}2m$
H: $(2/3, 1/3, 1/2)$	$[4\pi/3a, 0, \pi/c]$	$\bar{6}2m$
M: $(1/2, 0, 0)$	$[\pi/a, -\pi/\sqrt{3}a, 0]$	mmm
L: $(1/2, 0, 1/2)$	$[\pi/a, -\pi/\sqrt{3}a, \pi/c]$	mmm

Bundan başqa,  $\overline{\Gamma A} = \pi/c$ ,  $\overline{\Gamma K} = 4\pi/3a$ ,  $\overline{\Gamma M} = 2\pi/\sqrt{3}a$ ,  $\overline{MK} = 2\pi/3a$ .

Qrafen superqəfəslərindəki əlaqələr (bağlar) sərbəst atomların elektron konfigurasiyaları nəzərə alınmaqla təsvir edilmişdir: C –  $[[\text{He}]2s]^2 2p^2$ , Li –  $[[1s]^2 2s^1]$ . Hesablama baza dəstinə daxil olan müstəvi dalğaların maksimum kinetik enerjisi üçün həddi 500 eV idi. Belə bir hədd səth enerjisinin hesablamasında iki ardıcıl iterasiya üçün ümumi enerjilər fərqi vahid qəfəs (hüceyrə) üçün  $10^{-4}$  eV-dən çox olmadıqda ümumi enerjinin yaxınlaşmasını təmin edir.

GP-Li\_ads və GP\_V-Li\_ads strukturlarının optimallaşdırılması səth təbəqələrinin atomlarına 0,01 eV/Å olan minimum qüvvələrə çatana qədər aparılmışdır. Optimallaşdırma zamanı atom mövqələrinin

relaksasiyası (rahatlaması) GP səthinə doğru planar istiqamətdə aparılmışdır.

Səthdəki Li\_ads adatomunun  $E_{ads}^{Li}$  adsorbsiya enerjisi optimallaşdırılmış qrafen superhüceyrələrində hesablanmışdır. GP-Li\_ads və GP\_V-Li\_ads rahatlaşdırılmış superhüceyrələrində adsorbsiya enerjisi aşağıdakı düsturla hesablanmışdır

$$E_{ads}^{Li} = E_{GP-Li}^{total} - E_{GP} - E_{Li} \quad (1)$$

burada  $E_{(GP-Li\_ads)}$  litium adatomlu qrafenin (GP substratının) ümumi enerjisi,  $E_{GP}$  substratın ümumi enerjisi,  $E_{Li}$  tərəfləri  $15 \times 15 \times 15 \text{ \AA}$  olan boş hüceyrədə Li adatomunun ümumi enerjisidir.

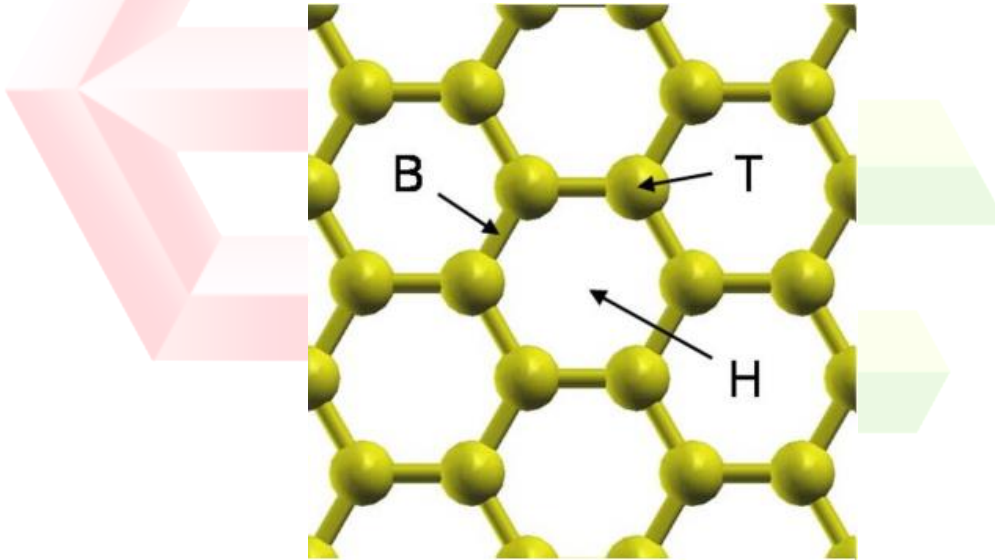
### 3. NƏTİCƏLƏR VƏ MÜZAKİRƏ

#### 3.1. Adsorbsiya

GP-Li\_ads və GP\_V-Li\_ads relaksasiya olunmuş strukturlarının xassələrini hesablamaq üçün DFT LSDA metodundan istifadə edilmişdir. Li\_ads atomlarının GP səthində adsorbsiyası üçün üç müxtəlif mövqe üçün (körpücük C-C əlaqəsində yerləşən adatom - B sahəsi, karbon atomunun üstündə yerləşən adatom - T sahəsi, pətek quruluşda altıbucaqlının boşluğunda yerləşən adatom - H sahəsi) hesablamalar aparılmışdır (şək. 4).

Bizim hesabladığımız defekt əmələgəlmə enerjisi ( $E_f^V$ ) GP\_V-Li\_ads-də litium adatomunun səthdə müxtəlif yerləşmə mövqeləri üçün mənfəi dəyərlərə malik idi.  $E_f^V$ -nin mənfəi qiymətləri GP\_V-Li\_ads defektli strukturunun GP-Li\_ads-dən daha sabit olduğunu göstərir. GP\_V-Li\_ads quruluşunu sabitləşdirmək üçün tələb olunan kritik litium konsentrasiyasını müəyyən etmək ayrıca bir məsələdir. Aşağıda biz Li-adatomun yerinin və monovakansiyanın tətbiqinin GP\_V-də Li atomlarının adsorbsiyasına və diffuziyasına necə təsir etdiyini nəzərdən keçiririk.

GP-Li\_ads və GP\_V-Li\_ads-də hesabladığımız  $E_{ads}^{Li}$  mənfəi enerjiləri sabit strukturlara uyğun gəlirdi. C-Li\_ads atomlarının içi boş (və ya "çuxur") mövqedə (sahədə) (H-sayt) bağlanma konfigurasiyaları daha sabit oldu. Defektsiz GP üçün C-C bağının uzunluğu  $1,42 \text{ \AA}$  idi.



Şəkil 4. GP-nin altıbucaqlı monolayında Li-adatomun yerləşməsi üçün üç müxtəlif mövqe: Adatom körpü C-C əlaqəsində (bağında) yerləşdikdə B-saytı (yaxud yer, mövqe), adatom karbon atomunun üstündə yerləşdikdə T-saytı, Adatom altıbucaqlının boşluğunda yerləşdikdə H-saytı.

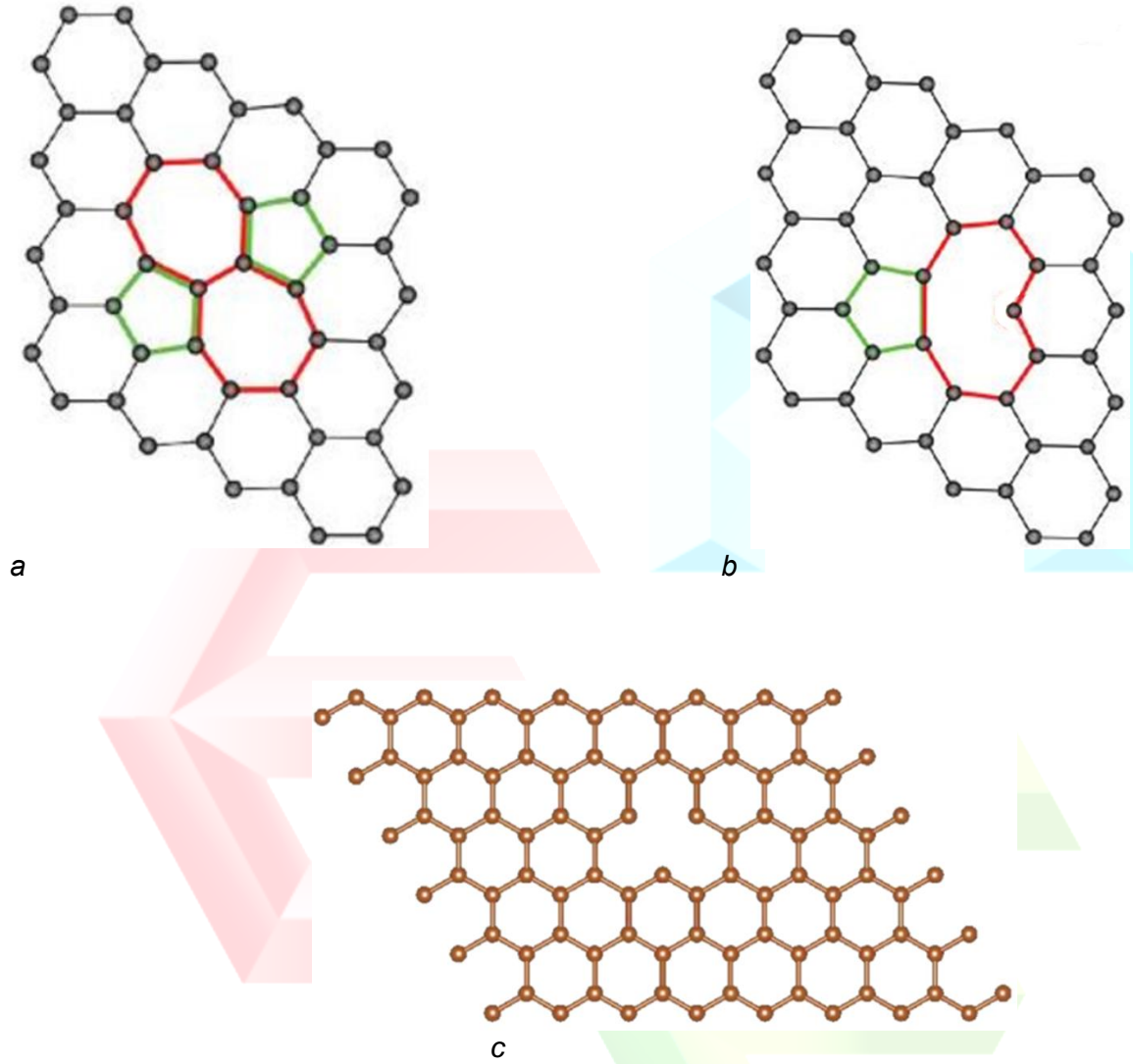
Qrafenin 2D kristal quruluşunun parametrləri və xassələri müxtəlif atom və molekullarla təmas nəticəsində dəyişir. Səthin xüsusiyyətləri, məsələn, atomların və molekulların adsorbsiyası ilə dəyişə bilər. Əgər ölçülü materialın səthinin monolayının  $10^{15} \text{ at/sm}^2$ -dən ibarət olduğunu fərz etsək, onda belə bir adatom təbəqəsi dərhal yaradılmalıdır. Adatomların və interfeyslərin belə monoqatının formalaşması 2D sisteminin enerjisinin artmasına səbəb olur.

Bu halda 2D sistemə əlavə edilmiş bir adatomun (i) kimyəvi potensialı üçün yazıla bilər:  $\mu_i = (dG/dn_i)_{P,T}$  və ya  $\mu_i = (dF/dn_i)_{V,T}$ .

Əgər fərz etsək ki, məsələn, litiumun qrafen GP-nin səthində adsorbsiyası kondensə edilmiş fazada və

sabit həcmdə baş verir, onda  $\Delta G = \Delta F$ . Burada G və F müvafiq olaraq Gibbsin sərbəst enerjisi və Helmholtz enerjisidir.

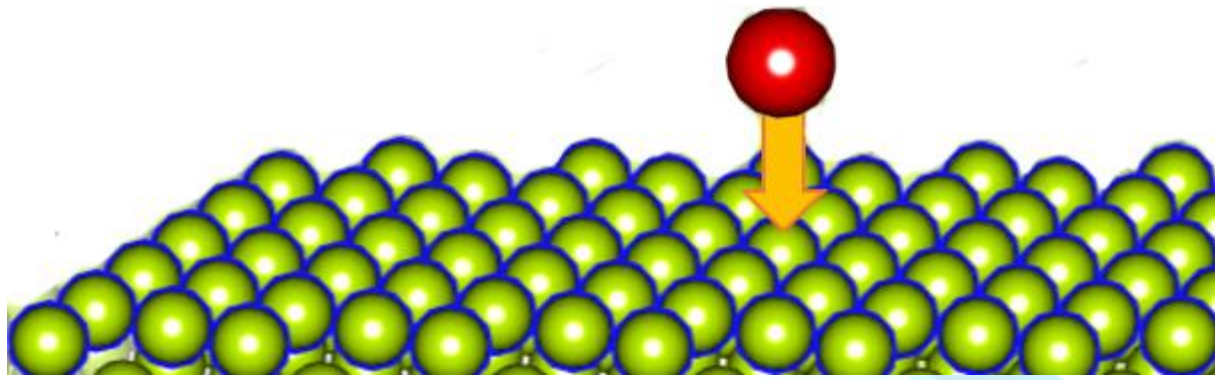
GP strukturunda defektlərin olması qrafenin xassələrinə də təsir edir. Xüsusilə GP strukturunda olan qüsurlar aşqar atomlarının adsorbsiyasına və diffuziyasına təsir göstərir. Qrafen quruluşunda olan nöqtəvi (xüsusi) qüsurlar mühüm qüsurlardır (şək. 5).



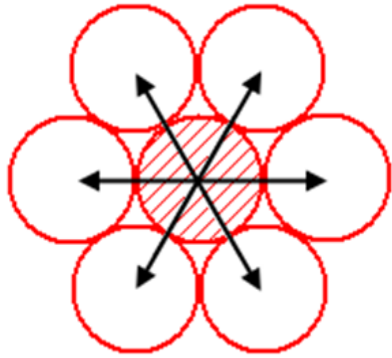
Şəkil 5. Qrafen strukturlarının sxemi. (a) Karbon atomlarının sayının qorunub saxlandığı Stone-Wales qüsuru, (b) qrafendə bir vakansiya yaxınlığındakı kimyəvi bağın gücündəki dəyişiklik, (c) bir vakansiyalı qrafen.

### 3.1.1. 5×5 superqəfəsləri GP – Li<sub>ads</sub> və GP<sub>V</sub> – Li<sub>ads</sub>

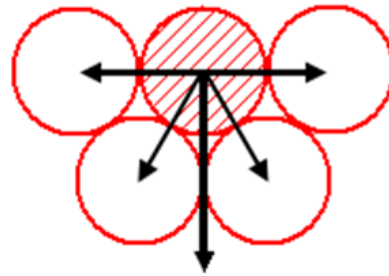
5 × 5 superqəfəsləri GP-Li<sub>ads</sub> və GP<sub>V</sub>-Li<sub>ads</sub>-in ilkin monolaylarında litium adsorbsiyasının DFT LSDA hesablamalarının nəticələrini nəzərdən keçirək. Belə qrafen səthləri elektron çatışmazlığı xarakteri daşıyır. Bu, faza sərhədində molekullarası qarşılıqlı təsirin kompensasiya olunmamış qüvvələri səbəbindən baş verir (Şəkil 6).



a



b



c

Şəkil 6. Qrafen-litium sisteminin faza sərhəddində molekullarası qarşılıqlı təsir qüvvələrinin sxemi: a – adsorbat (Li) – adsorbent (GP) sistemi; b – kompensasiya edilmiş qüvvələr, c – kompensasiya olunmayan qüvvələr.

GP\_V substratda Li\_ads adsorbsiya vəziyyətində, C-Li bağı adsorbsiya qüvvəsi sahəsində və səthə yaxın van der Waals qarşılıqlı təsirinin artması səbəbindən gücləndirilir. C/Li interfeysinin yaxınlığında kompensasiya olunmayan molekullarası qüvvələr səbəbindən Gibbs enerjisi azalır.

GP-Li\_ads və GP\_V-Li\_ads superqəfəslərinin səthindəki Li\_ads adatomunun (1)  $E_{ads}^{Li}$  tənliyindən istifadə edərək DFT hesablamalarının nəticələri litiumun müxtəlif yerləri (H-, B- və T-sahəsi) üçün müqayisə edilmişdir.

Qrafen üzərində Li\_ads atomlarının  $E_{ads}^{Li}$  hesablanmış adsorbsiya enerjiləri göstərdi ki, GP-nin H-saytında Li\_ads mövqeyi ən böyük mənfi qiymətə malikdir. Li\_ads-in bu düzülüşü GP-nin B- və T-saytlarında Li\_ads-dan daha sabit konfigurasiya verir. Eynilə GP\_V-Li\_ads üçün də altı üzvlü C-C halqasının mərkəzində Li\_ads H-saytında, daha sabit konfigurasiya verir.

B-saytındakı ilkin GP monolayerində Li adsorbsiyasının hesablanmış enerjisi, 2,40 Å Li-C bağ uzunluğunda, Li-adatom karbon atomunun üstündə yerləşdiyi zaman, yeni T-saytında olduğundan daha yüksəkdir. Vakansiya ətrafında Li adsorbsiya üçün hesablanmış  $E_{ads}^{Li}$  və bu vakansiya ətrafındakı müxtəlif bölgələrdə Li adsorbsiya enerjiləri də litiumun H-saytında yerləşdikdə ən aşağı enerji  $E_{ads}^{Li}$ -ni göstərdi. Qüsurlu GP\_V-də Li adsorbsiya enerjiləri ilkin GP monolayerindəki  $E_{ads}^{Li}$  enerjilərindən aşağıdır.

Beləliklə, GP-Li\_ads və GP\_V-Li\_ads sistemlərinin müxtəlif mövqələrində (H-, B- və T-saytı) Li\_ads adsorbsiyasının hesablanmış məlumatlarının müqayisəsi göstərdi ki, Li-adsorbsiya enerjisi bütün bu üç hallarda mənfi qiymətə malikdir. Li\_ads adatomunun H- mövqeyində yerləşməsi  $E_{ads}^{Li}$ -nin daha mənfi qiymətinə, sonra B- mövqeyinə və sonra T- mövqeyinə uyğun gəlir. Başqa sözlə, H-mövqeyində GP-Li\_ads və GP\_V-Li\_ads konfigurasiyaları daha sabitdir.

Səth enerjisi  $E^{sur} = 0.5 \frac{(E_{slab} - N \cdot E_{until cell})}{area}$  kimi müəyyən edilmişdir. Bu halda, H-saytı və ya sahəsi Li adsorbsiya üçün daha sabit yerdir və Li ilkin GP ilə müqayisədə qüsurlu GP\_V monolayerində daha əlverişli adsorbsiya enerjisinə malikdir. Güclü bağlama enerjisi GP\_V-Li\_ads-in artan tutumuna səbəb olur.



GP-Li<sub>ads</sub> və GP\_V-Li<sub>ads</sub> səthində çuxur H-mövqeyində litiumun adsorbsiya enerjisi Cədvəl 2-də verilmişdir. GP və GP\_V səthində E<sub>ads</sub><sup>Li</sup> adsorbsiya enerjisinin mənfi qiyməti adsorbsiya prosesinin ekzotermik olduğunu və fiziki udulmaya daha yaxın olduğunu göstərir.

Cədvəl 2. GP-Li və GP\_V-Li adlara əsaslanan 5 × 5 superhüceyrələrdə qrafen substratda bağ uzunluğu, litium adatom hündürlüyü Li<sub>ads</sub> və Li atomu üçün litium adsorbsiya enerjisi (E<sub>ads</sub><sup>Li</sup>). Litium adatomu nömrələnmiş karbon atomunun yanında altı üzvlü C-C halqasının mərkəzində H-sayında 6 bucaqlının “çuxurunrdə” yerləşir. C<sub>15</sub> və C<sub>24</sub> atomları superhüceyrələrdə vakansiya ilə sərhəddədir

Konfigurasiya 5×5 superqəfəs	$d(C - C), \text{Å}$	$d(C - Li_{ads}), \text{Å}$	$h_0(C - Li_{ads}), \text{Å}$	$E_{ads}^{Li}, eV$
GP – Li <sub>ads</sub>	1.43	1.81 (C14 – Li <sub>ads</sub> )	1.75	-0.72
GP <sub>V</sub> – Li <sub>ads</sub>	1.42	2.25 (C24 – Li <sub>ads</sub> )	1.76	-1.46
GP – Li <sub>ads</sub>	1.43	2.16 (C35 – Li <sub>ads</sub> )	1.73	-0.73
GP <sub>V</sub> – Li <sub>ads</sub>	1.42	2.26 (C15 – Li <sub>ads</sub> )	1.73	-1.47

Cədvəl 2-dən göründüyü kimi, Li<sub>ads</sub> adatomunun üstünlük verdiyi mövqə GP səth təbəqəsinin atomları tərəfindən əmələ gələn karbon altıbucaqlının mərkəzindəki “çuxur” H-mövqeyidir.

Homogen GP-Li<sub>ads</sub> və qeyri-homogen GP\_V-Li<sub>ads</sub> səthlərində E<sub>ads</sub><sup>Li</sup>-nin mənfi qiymətləri litiumun səthdə öz-özünə adsorbsiya ilə yığılması ehtimalının yüksək olduğunu göstərir. Bu zaman litium atomları qrafen strukturlarının səthində adsorbsiya olunaraq monomolekulyar təbəqə əmələ gətirir. Beləliklə, GP-Li<sub>ads</sub> və GP\_V-Li<sub>ads</sub>-in E<sub>ads</sub><sup>Li</sup> strukturlarının müqayisəsi GP\_V-Li<sub>ads</sub>-də daha az adsorbat-adsorbent əlaqə enerjisini göstərir.

GP-Li<sub>ads</sub> supercell-də d<sub>(C-Li)</sub> bağ uzunluğu (1.81 Å) ilkin qrafenin d<sub>(C-C)</sub> bağ uzunluğundan (1.42 Å) daha uzundur. Beləliklə, yuxarıda deyilənlərdən belə nəticə çıxır ki, tədqiq edilmiş supercell konfigurasiyalarında GP-Li<sub>ads</sub> və GP\_V-Li<sub>ads</sub>, burada Li<sub>ads</sub> qrafen karbon altıbucaqlının çuxurundakı H-mövqeyində Li-adsorbsiyası zamanı strukturlar daha stabil olur.

Qüsurlu (V monovakansiyadır) 5×5 GP\_V-Li<sub>ads</sub> supercellində, çuxur H-mövqeyində Li<sub>ads</sub> adatomunun adsorbsiyası d<sub>(C-Li<sub>ads</sub>)</sub> bağ uzunluqlarını azaldır. Bu, Li<sub>ads</sub> adatom yükünün supercellin karbon atomlarına ötürülməsi ilə əlaqədardır. Beləliklə, Li<sub>ads</sub> elektron sıxlığının karbon atomlarına keçməsi səbəbindən qüsurlu substrat GP\_V quruluşu təhrif olunur. GP\_V-Li<sub>ads</sub> supercell vakansiyasının mərkəzində adsorbsiya edilmiş litium atomu müvafiq olaraq H-sahəsi üçün -1,49 eV, B-sahəsi üçün -1,43 eV və T-sahəsi üçün -1,40 eV-ə bərabər olan E<sub>ads</sub><sup>Li</sup> adsorbsiya enerjisinə malikdir.

GP-Li<sub>ads</sub> və GP\_V-Li<sub>ads</sub>-da qrafen təbəqəsinin B- və T-mövqələrində litium adatomunun adsorbsiya qabiliyyətində qiymətləndirilmişdir (Cədvəl 3). Müqayisə üçün DFT GGA-PBE funksionalı nəticələrini istifadə edərək hesablanmış GP-Li<sub>ads</sub> üçün E<sub>ads</sub><sup>Li</sup> qiymətləri də verilmişdir.

Cədvəl 3. 5×5 supercell GP-Li<sub>ads</sub> üçün hesablanmış litium adatom üçün adsorbsiya enerjiləri: Li<sub>ads</sub> üçün çuxur H-saytı, körpü B-saytı və C atomunun üstündən Li<sub>ads</sub> yerləşməsi T-saytı

5×5 GP – Li <sub>ads</sub> konfigurasiyası	Li <sub>ads</sub> yerləşdiyi saytlar	GP-də $d(C - Li_{ads}), \text{Å}$	$h_0(C - Li_{ads}), \text{Å}$	$E_{ads}^{Li}, eV$
Bizim hesablama DFT LSDA	H	1.81	1.75	-0.72
	B	1.79	1.71	-0.70
	T	1.77	1.74	-0.67
[14] DFT GGA-PBE	H	2.23	1.71	-1.096
	B	2.09	1.88	-0.773
	T	2.02	1.89	-0.754

GP\_V-Li\_ads-də C-C körpüsündə yerləşən B-mövqeyində qrafenin səthində Li\_ads atomunun adsorbsiyası Li\_ads-in T-mövqeyi ilə müqayisədə daha sabit konfigurasiya verir. Üstəlik, qüsursuz qrafenlə müqayisədə, GP\_V-Li\_ads konfigurasiyasının  $E_{ads}^{Li}$  qiyməti bir qədər azdır və yuxarıda göstəriləyi kimi, H-sahəsi üçün -1,49 eV-dir. Li\_ads adatomunun qrafen üzərindəki yerini vakansiya mərkəzindən uzaqlaşdırmaq C-Li\_ads bağıının uzunluğunu artırır. Li\_ads mövqeyi dəyişdirildikdə vakansiya yaxınlığındakı qrafen C atomları ilə Li\_ads adatomu arasında itələyici qüvvənin azalması ilə əlaqələndirilə bilər.

### 3.1.2. 6×6 superqəfəsləri GP – Li və GP<sub>V</sub> – Li<sub>ads</sub>

Yuxarıdakı 5×5 superqəfəs GP-Li və GP\_V-Li\_ads kimi, 6×6 superqəfəslərinin DFT LSDA hesablamaları göstərir ki, təmiz qrafenlə müqayisədə, vakansiya-qüsurlu qrafen GP\_V-də Li\_ads adsorbsiya qabiliyyəti daha yüksəkdir. GP\_V strukturundakı vakansiyalar səthdə Li\_ads klasterlərinin yaranmasının qarşısını alır. GP\_V materialı Li-batareyalarının anod materialı üçün vacib olan böyük Li\_ads udma qabiliyyətinə malikdir.

$E_{ads}^{Li}$  6×6 superqəfəsləri GP\_V-Li\_ads hesablamaları da mənfi qiymətlər verir: müvafiq olaraq çuxur H-mövqeyi üçün -1,49 eV, körpü B mövqeyi üçün -1,43 eV və yuxarı T mövqeyi üçün -1,40 eV.  $E_{ads}^{Li}$ -nin bu qiymətləri göstərir ki, qrafenin səth qatına vakansiya daxil edilməsi təmiz GP ilə müqayisədə GP\_V-nin adsorbsiya xüsusiyyətlərini yaxşılaşdırır.

### Nəticələr

5×5 və 6×6 superqəfəslərdə GP – Li<sub>ads</sub> və GP<sub>V</sub> – Li<sub>ads</sub> sisteməri üçün ilk dəfə olaraq DFT LSDA hesablamaları aparılmışdır. Li-ion batareyası üçün anod materialı kimi qrafen (GP) əsaslı superqəfəslərdə Li-adsorbsiyası enerjisi hesablanmışdır. Spin qütbləşməsi (LSDA) nəzərə alınmaqla elektron sıxlığı funksionalı nəzəriyyəsi (DFT) istifadə etdikdə daha dəqiq nəticələr alınmışdır. Təmiz qrafenlə yanaşı monovakansiyaya (GP\_V) malik GP monolayında litium atomunun adsorbsiya xassələrinin hesablanmış qiymətləri müqayisə edilmişdir. Litium atomunun adsorbsiya enerjisinin ( $E_{ads}^{Li}$ ) hesablanmış qiymətlərinə əsasən, GP-Li\_ads və GP\_V-Li\_ads-də superqəfəslərin monolayında litium adatomunun (Li\_ads) enerji baxımından stabil yeri müəyyən edilmişdir. Hesablamanın nəticələri (cədvəl 2, 3) göstərir ki, Li\_ads adatom monovakansiyalı qrafenin GP<sub>V</sub> – Li<sub>ads</sub> səthində H-saytda yerləşdikdə əlaqə enerjisi daha çox olur və  $E_{ads}^{Li}$  qiyməti daha mənfi olur:  $E_{ads}^{Li}$ , -1.49 eV H-saytı, -1.43 eV B- saytı və -1.40 eV T- saytı. 5×5 superqəfəslərdə GP – Li<sub>ads</sub> hesablamaların nəticəsinə görə:  $E_{ads}^{Li}$  (eV) = -0.72 (H-saytı), -0.70 для B-saytı və -0.67 T-saytı üçün. Başqa sözlə enerji cəhətdən Li\_ads olunması monolayda karbon atomunun yuxarı hissəsində (T-sahəsi) və ya körpücük vəziyyətlərində (B-sahəsi) adsorbsiya olunmaqdan, çuxur vəziyyətində (H-sahəsi) adsorbsiya olunmağa üstünlük verir. (rüblük olaraq 4-cü mərhələ)

### İstifadə edilmiş ədəbiyyat

1. Yoo E., Kim J., Hosono E., Zhou H.-S., Kudo T., Honma I. Large Reversible Li Storage of Graphene Nanosheet Families for Use in Rechargeable Lithium-Ion Batteries // Nano Letters. 2008. V. 8. No 8. P. 2277–2282. <https://doi.org/10.1021/nl800957b>
2. Lv W., Tang D.-M., He Y.-B., You C.-H., Shi Z.-Q., Chen X.-C., Chen C.-M., Hou P.-X., Liu C., Yang Q.-H. Low-Temperature Exfoliated Graphenes: Vacuum-Promoted Exfoliation and Electrochemical Energy Storage // ACS Nano. 2009. V. 3. No 11. P. 3730–3736. <https://doi.org/10.1021/nn900933u>
3. Jang B.Z., Liu C., Neff D., Yu Z., Wang M.C., Xiong W., Zhamu A. Graphene Surface-Enabled Lithium Ion-Exchanging Cells: Next-Generation High-Power Energy Storage Devices // Nano Letters. 2011. V. 11. No 9. P. 3785–3791. <https://doi.org/10.1021/nl2018492>
4. Das D., Kim S., Lee K.-R., Singh A.K. Li diffusion through doped and defected graphene. Physical Chemistry Chemical Physics. 2013. V. 15. No 36. P. 15128–15134. <https://doi.org/10.1039/C3CP52891J>
5. Lee E., Persson K.A. Li Absorption and Intercalation in Single Layer Graphene and Few Layer Graphene by First Principles // Nano Letters. 2012. V. 12. P. 4624-4628. <https://doi.org/10.1021/nl3019164>

6. Kühne M., Paolucci F., Popovic J., Ostrovsky P.M., Maier J., Smet J.H. Ultrafast lithium diffusion in bilayer graphene // Nature Nanotechnology. 2017. V. 12. P. 895-902. <https://doi.org/10.1038/nnano.2017.108>
7. Zhong K., Hu R., Xu G., Yang Y., Zhang J.-M., Huang Z. Adsorption and ultrafast diffusion of lithium in bilayer graphene: Ab initio and kinetic Monte Carlo simulation study // Physical Review B. 2019. V. 99. No 15. P. 155403–12. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.155403>
8. Асадов М.М., Мустафаева С.Н., Гусейнова С.С., Лукичев В.Ф., Тагиев Д.Б. Ab initio моделирование влияния расположения и свойств упорядоченных вакансий на магнитное состояние монослоя графена // Физика твердого тела. 2021. Т. 63. № 5. С. 680–689. [Asadov M.M., Mustafaeva S.N., Guseinova S.S., Lukichev V.F., Tagiev D.B. Ab initio modeling of the location and properties of ordered vacancies on the magnetic state of a graphene monolayer // Physics of the Solid State. 2021. V. 63. № 5. P. 680–689.] <https://doi.org/10.1134/S1063783421050036>
9. Асадов М.М., Мустафаева С.Н., Гусейнова С.С., Лукичев В.Ф. DFT моделирование электронной структуры и адсорбция германия в упорядоченном графене с вакансией // Микроэлектроника. 2022. Т. 51. № 2. С. 125–139. [Asadov M.M., Mustafaeva S.N., Guseinova S.S., Lukichev V.F. DFT Electronic Structure Simulation and Adsorption of Germanium in Ordered Graphene with a Vacancy // Russian Microelectronics. 2022. V. 51. № 2. P. 83–96.] <https://doi.org/10.1134/S1063739722010024>
10. Асадов М.М., Маммадова С.О., Гусейнова С.С., Мустафаева С.Н., Лукичев В.Ф. Моделирование адсорбции золота на поверхность дефектного графена // Микроэлектроника. 2022. Т. 51. № 6. С. 429–442. <https://doi.org/10.31857/S054412692270003X>.  
Asadov M.M., Mammadova S.O., Guseinova S.S., Mustafaeva S.N., Lukichev V.F. Modeling of Gold Adsorption by the Surface of Defect Graphene // Russian Microelectronics. 2022. V. 51. No. 6. P. 413–425. <https://doi.org/10.1134/S1063739722700159>
11. Perdew J.P., Zunger A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems // Physical Review B. 1981. V. 23. № 10. P. 5048–5079. <https://doi.org/10.1103/physrevb.23.5048>
12. Kunschuh S., Gmitra M., Fabian J. Tight-binding theory of the spin-orbit coupling in graphene // Physical Review B. 2010. V. 82. No 24. P. 245412–11. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.245412>
13. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin zone integrations // Physical Review B. 1976. V. 13. № 12. P. 5188–5192. <https://doi.org/10.1103/physrevb.13.5188>
14. Chan K.T., Neaton J.B., Cohen M.L. First-principles study of metal adatom adsorption on graphene // Physical Review B. 2008. V. 77. No 23. P. 235430–12. <https://doi.org/10.1103/physrevb.77.235430>

### 1 illik elmi 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, elektron 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. (rüblük olaraq 1-ci mərhələ)

Qrafen (GP) monolaylarında karbon vakansiyalarının tətbiq edilməsi ilə lokal maqnit momentinin meydana gəlməsi aşkar edilmişdir. Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi çərçivəsindəki hesablamalara görə, vakansiyaları olan 18, 54 və 96 karbon atomlu qrafen super qəfəslərinin maqnit momentləri müvafiq olaraq 1.15, 1.33, 1.99  $\mu_B$ -dir. Bu işdə qrafen superqəfəsləri üçün əldə edilən nəticələr ədəbiyyatla uyğunlaşır. Qrafen superqəfəsinin elektron quruluşunda spin yuxarı və spin aşağı vəziyyətlərinə uyğun olan maqnit momentlərinin qiymətləri müvafiq olaraq 1.99  $\mu_B$  и 1.4  $\mu_B$ -dir. Spin yuxarı vəziyyəti ilə müqayisədə, spin aşağı vəziyyətin əmələ gəlmə enerjisi 0.02 eV azdır. GP səthində vakansiyalar

arasındaki məsafənin ( $r_{VC}$ ) dəyişməsi 96 karbon atomlu qrafen superqəfəsinin maqnit halına təsiri hesablanmışdır. Bu məsafənin ( $r_{VC}$ ), artması zamanı superqəfəsdəki maqnit halı dəyişir. Məsələn,  $r_{VC}$  7 Å-dən 12 Å-ə qədər artdıqda GP antiferromaqnitdən (AFM) ferromaqnit (FM) hala keçir. Bu vakansiyalar arasındakı məsafədə FM və AFM vəziyyətləri arasındakı enerji fərqi 0.006 eV ilə -0.01 eV arasında dəyişir. Vakansiyaları olan qrafendə karbon mono- və divakansiyalarının əmələ gəlmə enerjisinin ( $E_f$ ) hesablanması modeli seçilmiş və hesablanmış  $E_f$  qiymətləri müvafiq olaraq 7.3 və 7.2 eV-dir. Vakansiyaların hesablanan əmələgəlmə enerjilərinin qiymətləri ədəbiyyatla uyğunlaşır. (rüblük olaraq 2-ci mərhələ)

Qızıl atomlarının qrafenin defektli səthində adsorbsiyasının modelləşdirilməsinin əsas nəticələri aşağıdakılardır. GP  $\langle Au_{ads} \rangle$  və monovakansiyalı GP<sub>V</sub>  $\langle Au_{ads} \rangle$  5 × 5 superqəfələrinin lokal spin sıxlığı yaxınlaşmasından (LSDA) istifadə edərək sıxlığın funksional nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində hesablamaları aşağıdakıları göstərir. Qrafenin superqəfələrinin monolay səthində karbon atomunun yuxarı hissəsində adsorbsiya edilmiş qızıl atomlarının Au<sub>ads</sub> (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  $\langle Au_{ads} \rangle$  və GP<sub>V</sub>  $\langle Au_{ads} \rangle$  adsorbsiya komplekslərində zona quruluşu və hallar sıxlığının hesablanması göstərir ki, bu komplekslərdə yük daşıyıcıları lokallaşdır və onların hərəkəti yüklərin diffuziyasında əhatə edir. Qrafen superqəfələrinə qızıl atomunun (Au<sub>ads</sub>) 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<sub>ads</sub> adsorbsiya enerjisinin qiymətlərini düzəltməyə imkan verir. Adsorbsiya enerjilərinin  $E_{ads}^T$  LSDA üsulu ilə hesablanmış qiymətləri, spin korreksiyasını nəzərə aldıqda, LDA ilə hesablanmış  $E_{ads}^T$ -dən orta hesabla 0.34 eV yüksəkdir. GP<sub>V</sub>  $\langle Au_{ads} \rangle$  strukturunun Au<sub>ads</sub>-in adsorbsiya enerjisi  $E_{ads}^T$ , defektsiz GP  $\langle Au_{ads} \rangle$   $E_{ads}^T$ -dən aşağıdır. GP  $\langle Au_{ads} \rangle$  və GP<sub>V</sub>  $\langle Au_{ads} \rangle$ -da adsorbsiya enerjisi səthin qüsursuzluğundan (defektlərdən) asılıdır və səthin defektliyi azaldıqca  $E_{ads}^T$  azalır. LSDA üsulu ilə 5 × 5 qrafen GP  $\langle Au_{ads} \rangle$  və GP<sub>V</sub>  $\langle Au_{ads} \rangle$  superqəfələri üçün hesablanmış lokal maqnit momentləri ( $\mu_B$ ) bir-birindən fərqlənir. Spin-orbital qarşılıqlı təsirini və Au-nun f-atom vəziyyətlərinin parçalanmasını nəzərə alaraq, GP  $\langle Au_{ads} \rangle$  superqəfələrinin hesablanmış ümumi maqnit momenti 0.8  $\mu_B$ -dir. GP<sub>V</sub>  $\langle Au_{ads} \rangle$  superqəfəsdə ümumi lokal maqnit momentinin qiyməti artır və 1.01  $\mu_B$  təşkil edir. GP<sub>V</sub>  $\langle Au_{ads} \rangle$  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. (rüblük olaraq 3-cü mərhələ)

5×5 və 6×6 superqəfələrdə GP – Li<sub>ads</sub> və GP<sub>V</sub> – Li<sub>ads</sub> sisteməri üçün ilk dəfə olaraq DFT LSDA hesablamaları aparılmışdır. Li-ion batareyası üçün anod materialı kimi qrafen (GP) əsaslı superqəfələrdə Li-adsorbsiyası enerjisi hesablanmışdır. Spin qütbləşməsi (LSDA) nəzərə alınmaqla elektron sıxlığı funksional nəzəriyyəsi (DFT) istifadə etdikdə daha dəqiq nəticələr alınmışdır. Təmiz qrafenlə yanaşı monovakansiyaya (GP<sub>V</sub>) malik GP monolayında litium atomunun adsorbsiya xassələrinin hesablanmış qiymətləri müqayisə edilmişdir. Litium atomunun adsorbsiya enerjisinin ( $E_{ads}^{Li}$ ) hesablanmış qiymətlərinə əsasən, GP-Li<sub>ads</sub> və GP<sub>V</sub>-Li<sub>ads</sub>-də superqəfələrin monolayında litium atomunun (Li<sub>ads</sub>) enerji baxımından stabil yeri müəyyən edilmişdir. Hesablamaların nəticələri (cədvəl 2, 3) göstərir ki, Li<sub>ads</sub> adatom monovakansiyalı qrafenin GP<sub>V</sub> – Li<sub>ads</sub> səthində H-saytda yerləşdikdə əlaqə enerjisi daha çox olur və  $E_{ads}^{Li}$  qiyməti daha mənfi olur:  $E_{ads}^{Li}$  - 1.49 eV H-saytı, -1.43 eV B- saytı və -1.40 eV T- saytı. 5×5 superqəfələrdə GP – Li<sub>ads</sub> hesablamaların nəticəsinə görə:  $E_{ads}^{Li}$  (eV) = -0.72 (H-saytı), -0.70 B-saytı və -0.67 T-saytı üçün. Başqa sözlə enerji cəhətdən Li<sub>ads</sub> olunması monolayda karbon atomunun yuxarı hissəsində (T-sahəsi) və ya körpücük vəziyyətlərində (B-sahəsi) adsorbsiya olunmaqdan daha, çuxur vəziyyətində (H-sahəsi) adsorbsiya olunmağa üstünlük verir. (rüblük olaraq 4-cü mərhələ)

4	<p>Layihənin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə olunan üsul və yanaşmalar (burada doldurmalı)</p> <p>Fiziki və kimyəvi modelləşdirmə və kvant hesablama üsulu, nanomodellərin seçilməsi və hesablanması, elektron quruluşunun qeyri-empirik hesablanması üsulları, funksional sıxlıq nəzəriyyəsi, lokal sıxlıq yaxınlaşması (LDA), lokal spin sıxlıq yaxınlaşması (LSDA), kvant-kimyəvi hesablamalarda funksionalın seçilməsi, səthdə adsorbsiyanın tədqiqi.</p>
5	<p>Layihə üzrə elmi nəşrlər (məqalələr, monoqrafiyalar, icmallar, konfrans materialları, tezislər) (dərc olunmuş, çapa qəbul olunmuş və çapa göndərilmişləri ayrılıqda qeyd etməklə) (surətlərini əlavə etməli!) (burada doldurmalı)</p> <p>Xaricdə (İmpakt-faktorlu jurnalda) layihənin 1, 2 və 3-cü mərhələləri üzrə 3 məqalə, 4-cü mərhələ üzrə isə 4 məqalə, yəni 2022-ci ildə layihə nəticələri üzrə ümumilikdə 7 məqalə dərc edilib.</p> <p>1. Asadov M.M., Mustafayeva S.N., Guseynova S.S., Lukichev V.F., Tagiev D.B. Modeling structural and energy characteristics of atoms in a GaS 2D-crystal with point defects // <i>Physics of the Solid State</i>. 2022. Vol. 64. No. 1. P. 44–57. <a href="https://doi.org/10.21883/FTT.2022.01.51830.182">https://doi.org/10.21883/FTT.2022.01.51830.182</a> <a href="http://journals.ioffe.ru/issues/83">http://journals.ioffe.ru/issues/83</a> (1-ci mərhələ)</p> <p>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 // <i>Russian Microelectronics</i>, 2022. Vol. 51. No. 2. P. 103–116. <a href="https://doi.org/10.1134/S1063739722010024">https://doi.org/10.1134/S1063739722010024</a> (2-ci mərhələ)</p> <p>3 Asadov M.M., Mammadova S.O., Guseynova S.S., Mustafayeva S.N., Lukichev V.F. Ab initio modeling of gold adsorption by the surface of defect graphene // <i>Russian Microelectronics</i>. 2022. Vol. 51. No. 6. P. 384–396. <a href="https://doi.org/10.1134/S1063739722700159">https://doi.org/10.1134/S1063739722700159</a> (3-cü mərhələ)</p> <p>4 Мустафаева С.Н., Асадов М.М., Гусейнова С.С., Джаббаров А.И., Лукичев В.Ф. Электронные, диэлектрические свойства и перенос заряда в монокристалле <math>TiGaS_2: Nd^{3+}</math> на постоянном и переменном токе // ФТТ. 2022. Т. 64. № 4. С. 428-436. <a href="https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/52182">https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/52182</a> <a href="https://doi.org/10.21883/FTT.2022.04.52182.251">https://doi.org/10.21883/FTT.2022.04.52182.251</a> (4-cü mərhələ)</p> <p>5 Асадов С.М., Мустафаева С.Н., Лукичев В.Ф., Келбалиев К.И. Концентрационные зависимости переноса заряда и кинетика Монте-Карло моделирования роста 2D моно- и нанокристаллов халькогенидов галлия // Микроэлектроника. 2022. Т. 51. № 1. С. 48-59. <a href="https://doi.org/10.31857/S054412692106003X">https://doi.org/10.31857/S054412692106003X</a> (4-cü mərhələ)</p> <p>6 Asadov M.M., Mustafayeva S.N., Ahmedova N.A. Phase equilibria in the quasibinary <math>Li_2O \cdot 2B_2O_3 - Yb_2O_3 \cdot B_2O_3</math> system, assessment of stability, and conductivity of solid solutions based on <math>Li_2O \cdot 2B_2O_3</math> // <i>Russian Journal of Physical Chemistry A</i>. 2022. V. 96. No 3. pp. 508 – 514. <a href="https://doi.org/10.1134/S0036024422030050">https://doi.org/10.1134/S0036024422030050</a>. (4-cü mərhələ)</p> <p>7 Mustafayeva S.N. and Asadov S.M. Dielectric Spectroscopy of TI-Doped GaSe Single Crystals Subjected to <math>\gamma</math>-Irradiation // <i>International Workshop on Impedance Spectroscopy (IWIS)</i>. 2022. P. 102-104. <a href="https://doi.org/10.1109/IWIS57888.2022.9975115">https://doi.org/10.1109/IWIS57888.2022.9975115</a> (4-cü mərhələ)</p>

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) Yox
10	Layihə mövzusu üzrə elmi məruzələr (seminarlar, konfranslar, dəyirmi masalar və s. çıxışlar) (burada doldurmalı) Yox
11	Layihə üzrə əldə olunmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar (burada doldurmalı) Yox
12	Yerli həmkarlarla əlaqələr (burada doldurmalı) Layihə üzrə yerli həmkarlarla cari ildə 4 məqalə dərc edilib
13	Xarici həmkarlarla əlaqələr (burada doldurmalı) Layihə üzrə xarici həmkarlarla cari ildə 4 məqalə dərc edilib
14	Layihə mövzusu üzrə kadr hazırlığı (burada doldurmalı) Yox
15	Sərgilərdə iştirak (burada doldurmalı) Yox
16	Təcrübəartırmada iştirak və təcrübə mübadiləsi (burada doldurmalı) 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 \_\_\_22 Fev 2023\_\_\_\_\_

QEYD: bütün hallarda uyğun olan bəndlər doldurulmalıdır.

