



AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA ELMİN İNKİŞAFI FONDU

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Elmin İnkışafı Fonduun
elmi-tədqiqat programlarının, layihələrinin və digər elmi tədbirlərin
maliyyələşdirilməsi məqsədi ilə qrantların verilməsi üzrə
2013-cü il üçün 2-ci Gənc Alim və Mütəxəssislərin müsabiqəsinin
(EIF/GAM-2013-2(8)) qalibi olmuş və yerinə
yetirilmiş layihə üzrə

YEKUN ELMİ-TEXNİKİ HESABAT

Layihənin adı: Metal xalkohalogenidləri əsasında yeni çoxkomponentli funksional materialların
işlənilməsi

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: Babanlı Dünya Məhəmməd qızı

Qrantın məbləği: 8 000 manat

Layihənin nömrəsi: EIF/GAM-2-2013-2(8)-25/12/4-M-22

Müqavilənin imzalanma tarixi: 10 aprel 2014-cü il

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: 12 ay

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): 01 may 2014-cü il – 01 may 2015-ci il

Diqqət! Bütün məlumatlar 12 ölçülü Arial şrifti ilə, 1 intervalla doldurulmalıdır

Diqqət! Uyğun məlumat olmadığı təqdirdə müvafiq bölmə boş buraxılır

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

- 1 Layihənin həyata keçirilməsi üzrə yerinə yetirilmiş işlər, istifadə olunmuş üsul və
yanaşmalar
(burada doldurmali)

Təqdim edilən layihənin məqsədi ağır p-metalların kükürd, selen və tellurohalogenidləri əsasında yüksək tətbiqi xassələrə malik yeni çoxkomponentli termoelektrik materiallarının, topoloji izolyatorların və radiasiya detektorlarının işlənməsi olmuşdur. p-elementlərin xalkogenid və xalkohalogenidləri elektronik cihazlar üçün yeni materiallar kimi potensial maraq kəsb edirlər. Onların əksəriyyəti yarımkəcirici maddələr olub maraqlı termo-, foto-, seqnetoelektrik xassələrə malikdir. Bu birləşmələr və onlar əsasında bərk məhlullar energi çeviricilərində, spintronikada və kvant kompüterlərində

istifadə üçün perspektivli funksional materiallar hesab olunur. Ən son tədqiqatlar göstərir ki, talliumun bəzi xalkogenid (Tl_3SbS_3 , Tl_2SnS_3) və xalkohalogenidləri (Tl_6Sel_4 , Tl_6Sl_4) radasiya və γ -şüalanma detektoru kimi tətbiq edilə bilər.

Layihənin uğurla həyata keçirilməsi üçün Tl_5X_2Hal , Tl_6XHal_4 (X-S, Se, Te; Hal- Cl, Br, I) və s. oxşar birləşmələr əsasında bəzi üçlü və kvaziüçlü sistemlərdə faza tarazlıqları tədqiq edilmiş, onların hal diaqramları qurulmuşdur. Tədqiq edilən sistemlərdə yeni qeyri-stexiometrik fazalar aşkar edilərək onların ilkin kristallaşma və homogenlik sahələrinin təyin olunmuş, bir sıra kristalloqrafik və termodinamik xassələri öyrənilmişdir. Aldığımız təcrübə nəticələr kompleksi əsasında aşkar edilən fazaların istiqamətli sintezi və monokristallarının alınması metodları işlənmiş, bir sıra optimal tərkiblər üçün bu prosesləri həyata keçirilmişdir. Aşkar edilən yeni kimyəvi materialların tətbiqi xassələrinin öyrənilməsi məqsədilə onların bir sıra fiziki xassələri öyrənilmişdir.

Tədqiqatları aparmaq üçün əvvəlcə ilkin binar və üçlü birləşmələr sintez olunmuşdur. Sintez zamanı yüksək kimyəvi təmizliyə malik elementlərdən istifadə olunmuşdur (Tl, 99.999%, Alfa Aesar; S,Se,Te 99.999%, Alfa Aesar; I, 99%PA-ACS).

Konqruent əriyən birləşmələr elementar komponentlərin analitik tərəzidə on mində bir dəqiqliklə çəkimiş stexiometrik miqdalarını kvarts ampulalarda vakuum şəraitində birgə əritməklə sintez olunmuşdur. Tərkibində sintez olunan maddə olan ampulalar sobanın elektrik şəbəkəsində ayrılması ilə tədricən otaq temperaturuna qədər soyudulmuşdur. Bu birləşmələr konqruent əridiyindən soyuma zamanı mayedən birbaşa kristallaşırlar.

Peritektik reaksiya üzrə parçalanmaqla əriyən inkonqruent binar birləşmələr isə müvafiq peritektika temperaturlarından 20-30K aşağıda uzun müddət homogenləşdirici termiki emal edilmişlər.

Elementar yodun yüksək buxar təzyiqinə malik olmasını nəzərə alaraq tallium yodidlərinin sintezi qeyri ən-ənəvi yolla - vakuumlaşdırılmış ($\sim 10^{-2}$ Pa) kvarts ampulalarda ikizonalı, üfqi yerləşdirilmiş sobada aparılmışdır. Bu nümunələr tallium ilə elementar yodun qarşılıqlı təsirindən alınmışdır. "İsti" zonada (~ 500 K) reaksiya aparılmış, "soyuq" zonada isə yod buxarları yerləşmişdir. Ampulalar 3-4 saat ərzində daimi qarışdırılmaqla sobada saxlanmış və yod az-az udulmuşdur. Ampulaların uc hissəsində yodun miqdari azaldıqda onlar tədricən sobaya daxil edilmiş və qarışdırılmışdır.

TICl və TIBr isə metallik talliumdan dolayı yolla sintez edilmişdir. Əvvəlcə tallium duru sulfat turşusunda qızdırılmaqla ($70-80^\circ\text{C}$) həll edilmişdir. Alınmış 2%-li qaynar Tl_2SO_4 mihluluna xlorid (bromid) turşusu əlavə etməklə TICl(Br) çökdürülmüşdür. Ana məhlul soyuduqdan sonra TICl(Br) ayrılmış, dəfələrlə buzlu distillə suyu ilə yuyulmuş və uzun müddət $110-120^\circ\text{C}$ temperaturda qurudulmuşdur.

Sintez olunmuş ilkin binar birləşmələrin lazımı miqdalarını havasızlaşdırılmış kvarts ampulada birgə əritməklə üçlü birləşmələr sintez olunmuşdur. Sintektik ərimə xarakterinə malik olan birləşmələr uzun müddət ~ 500 s. termiki emal edilmişdir.

Sintez olunan birləşmələrin fərdiliyi DTA və RFA üsulları ilə təsdiq edilmişdir.

Tədqiq olunan sistemlərin nümunələri sintez edilmiş elementar, binar və üçlü komponentlərin müxtəlif nisbətlərdə kvarts ampulalarda birgə əridilməsilə hazırlanmışdır. Nümunələri tarazlıq halına yaxınlaşdırmaq üçün onlar solidusdan 20-30 K aşağıda ~ 500 s. termiki emal edilmişlər.

Tədqiq etdiyimiz üç və dördkomponentli sistemlərdə yeni qeyri-stexiometrik fazaların axtarışı məqsədilə müxtəlif fiziki-kiyəvi tədqiqat üsullarından istifadə edilmişdir. Belə ki, Tl-X-Hal (X-S,Se,Te; Hal - Cl,Br,I) və $Tl_2Te-TlHal-TlHal'$ (Hal, Hal' - Cl,Br,I) sistemlərində faza tarazlıqları geniş temperatur və qatılıq intervalında Differensial termiki analiz (DTA, Termoskan-2 cihazı, xromel-alümel termocütü), Differensial skanəedici kalorimetriya (DSK, DSC 404 F1 Pegasus cihazı), Rentgen faza analizi (RFA, Bruker D8 ADVANCED

difraktometri, CuK_α -şüalanma), elektrik hərəkət qüvvəsinin ölçülüməsi üsulu (EHQ, yüksək komlu rəqəmli B7-34A voltmetri) və s. üsullarla tədqiq edilmiş, onların faza diaqramlarının bir sıra poli- və izotermik kəsikləri, likvidus səthlərinin proyeksiyaları qurulmuşdur. Fazaların ilkin kristallaşma və homogenlik sahələri müəyyən edilmişdir. Kristalloqrafik tədqiqatlar RFA üsulu aparılmış, DTA və DSK üsulları ilə isə aşkar edilən fazaların ərimə temperaturları və istilikləri təyin edilmişdir. Bu fazaların parsial və integrallı əmələgəlmə termodinamik funksiyaları isə EHQ üsulu ilə təyin edilmişdir.

Aparılan tədqiqatlarda faza tarazlıqları diaqramlarının qurulması zamanı əsas metod kim DTA üsulundan istifadə olunmuşdur. Bu analiz metodu binar və daha mürəkkəb sistemlərdə müxtəlif tərkibli ərintilərin faza çevrilmələri temperaturunun təyini ilə hal diaqramlarını qurmağa imkan verir. Bu zaman nümunənin qızma və soyuma əyriləri şəkilir. İstilik effektləri əsasən qızma əyrilərindən götürülür. Qeydə alma pirometr vasitəsilə aparılır. Etalon maddə olaraq Al₂O₃ götürür. Differensial yazı zamanı sistemdə müşahidə olunan bütün istilik effektləri qeydə alınır. Bütün tərkiblər üçün termoqramlar çəkilir və bu zaman müşahidə olunan effektlərin temperaturu və növü xüsusi cədvəllərdə qeyd edilir. Bunların əsasında T-x diaqramı qurulur. Nümunə və etalonun eyni şəraitdə qızmasını təmin etmək üçün xüsusi paslanmayan polad bloklardan istifadə olunur.

Termoqramların çəkilməsi vakuum şəraitində aparılır. Tədqiq edilən sistemin nümunələri əvvəlcədən hazırlanır, pirometr isə təmiz indium, tallium, tellur, qalay, sink, sürmə, gümüş və misin ərimə temperaturları əsasında dərəcələnir.

Qurulmuş T-x diaqramlar digər fiziki-kimyəvi tədqiqat üsulları ilə təsdiq olunmuş və müvafiq xassə-tərkib diaqramları qurulmuşdur.

Mürəkkəb sistemlərdə faza tarazlıqlarının öyrənilməsi zamanı RFA metodu DTA nəticələrinin yoxlanılması üçün geniş istifadə olunur. Bu üsul ona əsaslanır ki, hər bir polivə ya monokristallik maddə rentgen şüalarının paralel və kifayət qədər monoxromatik seli ilə qarşılıqlı təsiri zamanı öz quruluşuna uyğun spesifik fərdi difraksiya mənzərəsi verir. Bu, çoxfazalı sistemdə müxtəlif maddələrin kristallarını fərqləndirməyə imkan verir. Difraksiya mənzərəsindəki Breqq bucağına θ , və əksetmə intensivliyinə əsasən maddələri identifikasiya etmək olur.

EHQ ölçmələri yüksək komlu rəqəmli B7-34A voltmetri vasitəsilə kompensasiya üsulu ilə həyata keçirilmişdir. Qatılıq dövrəsinin hazırlanması və EHQ ölçmələrinin aparılma metodikası ədəbiyyatda geniş şərh olunur. Elektrik hərəkət qüvvəsinin ölçülüməsi ilə təcrübələr aparmaq üçün əvvəlcə

(-) TI (bərk) / maye elektrolit + TI⁺ / [TI-X(X-S,Se,Te)-Hal (Hal –Cl,Br,I)] (bərk) (+) (1)
tipli qatılıq dövrəsi tərtib edilmişdir. EHQ ölçmələri 300-430K temperatur intervalında aparılmışdır. Elektrolit kimi tədqiq edilən sistemin növündən asılı olaraq kalium xlorid, bromid və ya yodidin qlıserində doymuş məhlulu (üzərinə ~0.5 kütłə% TIHal əlavə edilib) istifadə olunmuşdur. Sol elektrod olaraq metallik tallium, sağ elektrod olaraq isə tədqiq olunan sistemlərin əvvəlcədən sintez edilib tarazlıq halına salınmış nümunələri götürülmüşdür.

(1) tipli qatılıq dövrələrində aparılan ölçmələrin nəticələrinin analizi EHQ-nin qiymətlərinin təkrarlanan olduğunu və hər bir nümunə üçün 300-430K temperatur intervalında E-f(T) asılılıqlarının xəttiliyini göstərdi. Ona görə də biz tədqiq etdiyimiz nümunələrin hər biri üçün E və T qiymətləri toplularını xüsusi kompüter programı vasitəsilə ən kiçik kvadratlar üsulu ilə işləyib

$$E = a + bT + 2 \left[\frac{S_E^2}{n} + S_b^2 (T - \bar{T})^2 \right]^{1/2} \quad (2)$$

tipli xətti tənliklər tərtib etdik. Burada S_b^2 və S_E^2 - müvafiq olaraq b sabitinin və EHQ ölçmələrinin dispersiyası, n- E və T qiymətləri cütlərinin sayı, \bar{T} - orta temperatur, t- Stüdent kriteriyasıdır. Bizim təcrübələrdə $n \geq 20$ olduğundan 95% etibarlılıq səviyyəsində $t \approx 2$. (2) tipli tənliklər EHQ üsulu ilə termodinamik tədqiqatların nəticələrinin verilməsi üçün ən əlverişli və təcrubi naticələri daha dolğun əks etdirən tənliklər kimi müasir elmi ədəbiyyatda tövsiyyə olunur.

Alınan xətti tənliklər əsasında

$$\Delta\bar{G}_{\text{TI}} = -zFE$$

$$\Delta\bar{S}_{\text{TI}} = zF \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_p = zFb \quad (3)$$

$$\Delta\bar{H}_{\text{TI}} = -zF \left[E - T \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_p \right] = -zFa$$

(z- potensialəmələgətirici ionun yüküdür. TI^+ üçün $z=1$, F-Faradey ədədidir) termodinamik ifadələri vasitəsilə xəlitələrdə talliumun parsial molyar funksiyalarını hesablanmışdır.

Talliumun parsial termodinamik funksiyalarının tərkibdən asılılıq əyriləri tərkibin arasıkəsilməz funksiyasıdır. Bu, müvafiq sistemlərdə fasiləsiz əvəzolunma bərk məhlulların əmələ gəlməsini təsdiq edir. Parsial entropiyanın tərkibin dəyişməsilə monoton dəyişməsi bərk məhlullarda kristal qəfəsin simmetriyasında dəyişiklik baş verməməsi haqda RFA nəticələri ilə yaxşı uyğun gəlir.

Aşkar olunan aralıq fazaların standart əmələgəlmə termodinamik funksiyaları Gibbs-Dühem tənliyinin integrallanması yolu ilə hesablanmışdır. Xətalar səhvlerin toplanması üsulu ilə tapılmışdır. Aldığımız nəticələr yeni aralıq fazaların sintezi və monokristal halında alınması metodikalarının işlənməsinə və optimal texnoloji şəraitlərin seçilməsinə imkan yaradır.

Hesablamalar zamanı alınan termodinamik göstəricilər etibarlı və dəqiqlik fiziki-kimyəvi parametrlər yeni olub müxtəlif elektron-informasiya banklarına, həmçinin sorğu-məlumat kitablarına daxil edilə bilər.

Alınan yeni fazaların bəzi tətbiqi xassələri, o cümlədən onların dielektrik xassələri, elektrik keçiriciliyi, termoelektrik effektivliyi öyrənilmişdir. Sintez olunmuş $f = 5 \cdot 10^4 - 3.5 \cdot 10^7$ Hz tezlik intervalında kompleks dielektrik nüfuzluluğunun nisbi və minimal qiymətləri, dielektrik itgisinin bucaq əmsali və göstərilən tezlik intervalında $\sigma_{ac} - ac$ keçiriciliyi təyin edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, həmin tezlik intervalında TI_6Sl_4 monokristalı dielektrik əmsalinın və dielektrik keçiriciliyinin nəzərə çarpacaq qiymətinə malikdir. $f = 6 \cdot 10^6 - 3.5 \cdot 10^7$ Hz tezlik intervalında isə TI_6Sl_4 kristallarının ac keçiriciliyi $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$ qanununa tabedir. Bu halların sıxlığı (N_F) və enerji səviyyəsi (ΔE), həmçinin sıçrayışların orta müddəti (t) və məsafəsi (R) hesablanmışdır: $N_F = 2 \cdot 10^{18} \text{ eV}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$, $\Delta E = 41 \text{ meV}$, $t = 5 \cdot 10^{-8} \text{ s}$ və $R = 180 \text{ \AA}$.

Fiziki ölçmələrə aid aldığımız nəticələr Rusyanın "Физика твердого тела" jurnalında məqalə və Meksikada bu ilin Avqust ayında keçiriləcək XXIV International Materials Research Congress beynəlxalq konfransında tezis tezis şəklində çapa qəbul olunmuşdur.

Layihə çərçivəsində alınmış yeni fazalar effektiv termoelektrik materialları, topoloji izolyatorlar və radasiya detektorlarının alınması, xarakterizə edilməsi üçün tövsiyyə edilir.

Beləliklə, layihənin həyata keçirilməsi nəticəsində müxtəlif fiziki-kimyəvi analiz üsullarından istifadə etməklə, Ti-X-Hal (X-S,Se,Te ; $\text{Hal} - \text{Cl,Br,I}$) və $\text{Ti}_2\text{Te-TiHal-TiHal}'$ ($\text{Hal}, \text{Hal}' - \text{Cl,Br,I}$) tipli bir neçə sistemin faza tarazlıqları və fiziki-kimyəvi xassələri geniş temperatur və qatılıq intervalında öyrənilmiş, bir-birini təsdiq edən və qarşılıqlı uzlaşan nəticələr kompleksi alınmışdır.

Layihənin həyata keçirilməsi üzrə planda nəzərdə tutulmuş işlərin yerinə yetirilmə dərəcəsi (faizlə qiymətləndirməli)

(burada doldurmali)

Layihənin həyata keçirilməsi üzrə planda nəzərdə tutulmuş işlərin yerinə yetirilmə dərəcəsi 95% təşkil edir.

Hesabat dövründə alınmış **elmi nəticələr** (onların yenilik dərəcəsi, elmi və təcrübi əhəmiyyəti, nəticələrin istifadəsi və tətbiqi mümkün olan sahələr aydın şəkildə göstərilməlidir)

(burada doldurmali)

Layihə üzrə fiziki-kimyəvi analizin müxtəlif təcrübi tədqiqat üsullarından istifadə etməklə tallium əsasında bəzi üç və dördkomponentli sistemlər kompleks şəkildə tədqiq olunmuş, onların bəzi politermik və izotermik kəsikləri, eləcə də likvidus səthlərinin proyeksiyası qurulmuşdur. Öyrənilən sistemlərdə yeni qeyri-stexiométrik fazalar aşkar edilərək onların homogenlik və ilkin kristallaşma sahələri dəqiqləşdirilmişdir. Tədqiq edilən sistemlərdə aşkar edilən yeni fazaların kristalloqrafik və termoindamik xassələri tədqiq edilmişdir. Layihə çərçivəsində bir üçlü birləşmənin ($\text{Ti}_5\text{Te}_2\text{I}$) mükəmməl monokristalı yetişdirilmiş və onun kristal quruluşu ilk dəfə olaraq İspaniyanın Donostiya Fizika Elmi Mərkəzində açılmışdır.

Təqdim olunan layihədə alınmış yeni kimyəvi materiallar termoelektrik generatorları və termoelektrik soyuducuları istehsalında tətbiq oluna bilər. Belə materiallardan istifadə olunması yararsız istilik enerjisindən elektrik enerjisinin istehsal edilməsinə, eləcə də ətraf mühit üçün zərərsiz və uzunömürlü soyuducuların istifadəsinə geniş imkanlar yaradır. Alınan yeni materiallar həmçinin nüvə və γ -şüalanma detektorları kimi istifadə edilə bilər.

Layihə çərçivəsində (12 ay) tədqiq edilən sistemlərə aid alınmış nəticələr tamamilə yeni olub müxtəlif elektron-informasiya banklarına, həmçinin sorğu-məlumat kitablarına salına bilər. Aşkar edilmiş çoxkomponentli aralıq fazalar tərəfimizdən ilk dəfə alınmışdır. Onlar fərdi şəkildə sintez edilmiş və müxtəlif tədqiqat üsulları ilə identifikasiya edilmişlər. Həmin fazaların kristalloqrafik, termoindamik və digər fiziki-kimyəvi parametrləri yeni olub müxtəlif elektron-informasiya banklarına, həmçinin sorğu-məlumat kitablarına salına bilər.

Layihənin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə olunan əsas üsul və yanaşmalar differensial termiki analiz, elektrik hərəkət qüvvəsinin ölçüləməsi üsulu, mikroquruluş analizi, təklif və artıq tətbiq olunan yeni monokristal yetişdirilməsi metodikası, rentgen-quruluş analizi və elektron quruluşunun kvant-mexaniki hesablamalarıdır.

Layihə üzrə elmi nəşrlər (elmi jurnallarda məqalələr, monoqrafiyalar, icmallar, konfrans materiallarında məqalələr, tezislər) (dərc olunmuş, çapa qəbul olunmuş və çapa göndərilmişləri ayrılıqda qeyd etməklə, uyğun məlumat - jurnalın adı, nömrəsi, cildi, səhifələri, nəşriyyat, indeksi, Impact Factor, həmmüəlliflər və s. bunun kimi məlumatlar - ciddi şəkildə dəqiq olaraq göstərilməlidir) (surətlərini kağız üzərində və CD şəklində əlavə etməli!)

(burada doldurmali)

Layihə üzrə 12 elmi əsər hazırlanmışdır. Onlardan 7-si elmi məqalə, 5-i isə məruzə tezisidir. 3 məqalə, 1 tezis artıq nəşr olunub. Elmi əsərlərin ümumi siyahısı aşağıda təqdim olunur:

MƏQALƏLƏR

1. D.M.Babanlı. Tl_2Te - $TICl$ - TlI kvaziüçlü sistemində faza tarazlıqları. // AzTU. Elmi Əsərlər. 2014, c.2, № 2, s. 313-320 (dərc olunub)
2. D.M.Babanly, S.M.Bagheri, Z.Jamalarai, G.M.Guseynov, D.B.Tagiyev. T-x-y phase diagram of the system Tl - $TICl$ - S . // England, Chemistry Journal (2015). v.05, Issue 2, p.29-34 (dərc olunub)
3. Dunya M. Babanly, Imameddin R. Amiraslanov, Andrei V. Shevelkov, Dilgam B. Tagiyev Phase equilibria in the Tl - TlI -Se system and thermodynamic properties of the ternary phases. // Journal of Alloys and Compounds.2015. Accepted manuscript available online 30-APR-2015 (çapda olan) (İF-2.726)
4. D.M.Babanlı, Q.M.Hüseynov, R.Q.Hüseynova, A.L.Mustafayeva. Tallium yodidlərinin kükürdlə fiziki-kimyəvi qarşılıqlı təsiri. // Kimya problemləri, Bakı, 2015, №2 (çapa qəbul olunub)
5. С.Н.Мустафаева, Д.М. Бабанлы, М.М.Асадов, Д.Б. Тагиев. Частотная дисперсия диэлектрических коэффициентов и проводимости кристаллов Tl_6SI_4 .// Физика твердого тела 2015 (çapa qəbul olunub, № 136) (İF-0.782)
6. D.M.Babanlı, A.Ş.Əliyev, D.B.Tağıyev. Tallium yodidlərinin selenlə fiziki-kimyəvi qarşılıqlı təsiri. // Azərbaycan Kimya Jurnalı, 2015, №2 (çapa qəbul olunub)
7. Dunya M.Babanly, Akif Sh.Aliev, Vaqif A.Gasimov, Mahmoud M.Elrouby, Dilgam B. Tagiyev. An investigation of phase equilibria in the Tl - S - I system. // Materials science in Semiconductor Engineering. 2015 (IF -1.761) (çapa göndərilib)

TEZİSLƏR

1. Babanly D.M. The thermodynamic properties of $Tl_5Te_{3-x}Br_x$ solid solutions. / The role of multidisciplinary approach in solution of actual problems of fundamental and applied sciences, Baku, 2014, p.405-406 (dərc olunub)
2. Д.М.Бабанлы, А.Ш.Алиев, Д.Б.Тагиев. Некоторые особенности фазообразования и фазовых равновесий в системах Tl_2Te - $Tl\Gamma$ - $Tl\Gamma'$ (Γ , Γ -Cl, Br, I). Полифункциональные химические материалы и технологии. Г.Томск, Россия, 21-22 мая, 2015 (çapa qəbul olunub)
3. Babanly D.M.,Mustafayeva A.L.,Tagiyev D.B. Thermodynamic investigation of $Tl_5Te_{3-x}Cl_x$ solid solutions. XX International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia. RCCT 2015, June 22-26(çapa qəbul olunub)
4. Babanly D.M., Aliev Z.S.,Tagiyev D.B. New non- stoichiometric phases with Tl_5Te_3 structure in the Tl_2Te - TlX - TlX' (X, X'-Cl, Br, I) systems. International Conference on Applied Mineralogy and Advanced Materials. Taranto – Italy. 7-12 June, 2015(çapa qəbul olunub)
5. Asadov M.M., Mustafaeva S.N., Babanly D.M., Tagiev D.B. Dielectric spectroscopy of Tl_6SI_4 . XXIV International Materials Research Congress 2015. 16-20 August, Cancun, Mexico (çapa göndərilib)

5 İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər
(burada doldurmalı)

- 6 Layihə üzrə ezamiyyətlər (ezamiyyə baş tutmuş təşkilatın adı, şəhər və ölkə, ezamiyyə tarixləri, həmçinin ezamiyyə vaxtı baş tutmuş müzakirələr, görüşlər, seminarlarda çıxışlar və s. dəqiq göstərilməlidir)
(burada doldurmali)

Layihənin rəhbəri Babanlı Dünya Məhəmməd qızı 2015-ci ilin mart ayında İspaniyanın San Sebastian şəhərində yerləşən məşhur Donostiya Fizika Elmi mərkəzində (DİPC) elmi ezamiyyətdə olmuşdur. Ezamiyyət müddəti altı gün olmuş, həmin dövrə AMEA "Kataliz və Qeyri Üzvi Kimya Institutunda" yetişdirilərək aparılmış monokristal nümunələrinin kristal quruluşlarının açılmasına və onların elektron hesablamalarının aparılmasına dair görüşlər keçirilmiş və təcrübələr aparılmışdır. Hal - hazırda DİPC elmi mərkəzi ilə daimi əlaqə saxlanaraq yaxın gələcəkdə birgə müəllifliklə elmi məqalə hazırlanır.

- 7 Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak (əgər varsa)
(burada doldurmali)

- 8 Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak
(burada doldurmali)

- 9 Layihə mövzusu üzrə elmi məruzələr (seminar, dəyirmi masa, konfrans, qurultay, simpozium və s. çıxışlar) (məlumat tam şəkildə göstərilməlidir: a) məruzənin növü: plenar, dəvətli, şifahi və ya divar məruzəsi; b) tədbirin kateqoriyası: ölkədaxili, regional, beynəlxalq)
(burada doldurmali)

Layihənin rəhbəri Babanlı Dünya Məhəmməd qızı Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası ilə Azərbaycan Dövlət Neft Şirkətinin (SOCAR) birgə təşkilatçılığı ilə keçirilən "Fundamental və tətbiqi elmlərin (yer, texnika və kimya elmləri) aktual problemlərinin həllində multidisiplinər yanaşmanın rolü" adlı Gənc alim və mütəxəsislərin 1-ci Beynəlxalq Elmi Konfransında şifahi məruzə etmişdir.

Layihə rəhbəri həmçinin AMEA-nın "Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya" Institutunda laboratoriya seminarında layihə mövzusu üzrə çıkış etmişdir.

- 10 Layihə üzrə əldə olunmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar, komplektləşdirmə məmulatları
(burada doldurmali)

Layihə üzrə bir kompüter əldə olunmuşdur.

- 11 Yerli həmkarlarla əlaqələr
(burada doldurmali)

Layihə üzrə aparılan təcrubi işlər və onların müzakirəsi zamanı ölkəmizin bir sıra elmi təkətilər ilə, o cümlədən AMEA Fizika Institutu, Bakı Dövlət Universiteti, Naxçıvan Dövlət Universiteti ilə əməkdaşlıq edilmişdir. Alınan nəticələr həmin həmkarlarla birgə müəllifliklə çapa göndərilmişdir.

- 12 Xarici həmkarlarla əlaqələr
(burada doldurmali)

Layihə üzrə təqdim etdiyimiz nəşrlərin siyahısından da göründüyü kimi, tədqiqatlar zamanı biz İranın Elm və Texnologiya Universiteti (Iran University of Science and

Technology – Behshahr Branch), Lomonosov adına Moskva Dövlət Universiteti (Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Russia) və Misirin Sohaq Universiteti (Sohaq University, Egypt) ilə birgə əməkdaşlıq etmişik. Həmin təşkilatlarda çalışan həmkarlarımıza birgə elmi əsərlər nəşr olunmuşdur.

- 13 Layihə mövzusu üzrə kadr hazırlığı (əgər varsa)
(burada doldurmali)
- 14 Sərgilordə iştirak (əgər baş tutubsa)
(burada doldurmali)
- 15 Təcrübəartırmada iştirak və təcrübə mübadiləsi (əgər baş tutubsa)
(burada doldurmali)
- 16 Layihə mövzusu ilə bağlı elmi-kütləvi nəşrlər, kütləvi informasiya vasitələrində çıxışlar, yeni yaradılmış internet səhifələri və s. (məlumatı tam şəkildə göstərilməlidir)
(burada doldurmali)

SİFARIŞÇI:

Elmin İnkışafı Fondu

Müşavir

Babayeva Ədilə Əli qızı

(imza)

"08 05" 20115-ci il

İCRAÇI:

Layihə rəhbəri

Babəli Dünya Məhəmməd qızı

(imza)

"08" may 2015-ci il

Baş məsləhətçi

Daşdəmirova Xanım Faiq qızı

(imza)

"08" may 2015-ci il



AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA ELMIN İNKİŞAFI FONDU

MÜQAVİLƏYƏ ƏLAVƏ

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Elmin İnkışafı Fonduun
elmi-tədqiqat programlarının, layihələrinin və digər elmi tədbirlərin
maliyyələşdirilməsi məqsədi ilə qrantların verilməsi üzrə
2013-cü il üçün 2-ci Gənc Alim və Mütəxəssislərin müsabiqəsinin
(EIF/GAM-2013-2(8)) qalibi olmuş və yerinə
yetirilmiş layihə üzrə

ALINMIŞ NƏTİCƏLƏRİN ƏMƏLİ (TƏCRÜBİ) HƏYATA KEÇİRİLMƏSİ VƏ LAYİHƏNİN NƏTİCƏLƏRİNDƏN GƏLƏCƏK TƏDQİQATLARDADA İSTİFADƏ PERSPEKTİVLƏRİ HAQQINDA

MƏLUMAT VƏRƏQİ
(Qaydalar üzrə Əlavə 16)

Layihənin adı: Metal xalkohalogenidləri əsasında yeni çoxkomponentli funksional materialların işlənilməsi

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: Babanlı Dünya Məhəmməd qızı

Qrantın məbləği: 8 000 manat

Layihənin nömrəsi: EIF/GAM-2-2013-2(8)-25/12/4-M-22

Müqavilənin imzalanma tarixi: 10 aprel 2014-cü il

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: 12 ay

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): 01 may 2014-cü il – 01 may 2015-ci il

1. Layihənin nəticələrinin əməli (təcrübi) həyata keçirilməsi

1 Layihənin əsas əməli (təcrübi) nəticələri, bu nəticələrin məlum analoglar ilə müqayisəli xarakteristikası

(burada doldurmali)

Layihənin əsas məqsədi ağır p-metalların, xüsusilə telliumun kükürd, selen və tellurohalogenidləri əsasında yüksək tətbiqi xassələrə malik yeni çoxkomponentli termoelektrik materiallarının, topoloji izolyatorların və radiasiya detektorlarının işlənməsi olmuşdur.

Layihədə fiziki-kimyəvi analizin təcrübi tədqiqat üsulları kompleksindən istifadə etməklə $Tl-X-Hal$ ($X-S, Se, Te$; $Hal - Cl, Br, I$) və $Tl_2Te-TlHal-TlHal'$ ($Hal, Hal' - Cl, Br, I$) sistemlərində faza tarazlıqları tədqiq edilmiş, onların faza diaqramlarının bir sıra politermik və izotermik kəsikləri, həmçinin likvidus səthlərinin proyeksiyaları qurulmuşdur. Bu sistemlərdə mühüm tətbiqi əhəmiyyət kəsb edən Tl_5X_2Hal , Tl_6XHal_4 üçlü birləşmələri əsasında yeni qeyri-stexiometrik fazalar aşkar edilərək, onların ilkin kristallaşma və homogenlik sahələri təyin edilmişdir. Alınan

təcrübi nəticələr kompleksi əsasında aşkar edilən yeni fazaların istiqamətli sintezinin və monokristallarının alınmasının yeni bir üsulu işlənib hazırlanmış və bir sıra optimal tərkiblər üçün bu proseslər tətbiq olunmuşdur. Sintez edilən yeni fazaların və onlar əsasında kimyəvi materialların fundamental fiziki-kimyəvi (termiki, termodinamik, kristalloqrafik, mexaniki) və bəzi tətbiqi fiziki xassələri (termoelektrik, dielektrik və s.) öyrənilmişdir. Praktiki tətbiq üçün perspektivli xalkohalogenid birləşmələrinin tərkib və quruluşlarının mürəkkəbləşdirilməsi yolu ilə onların xassələrinin optimallaşdırılmasına nail olunmuşdur.

2

Layihənin nəticələrinin əməli (təcrübi) həyata keçirilməsi haqqında məlumat (istehsalatda tətbiq (tətbiqin aktını əlavə etməli); tədris və təhsildə (nəşr olunmuş elmi əsərlər və s. – təhsil sisteminə tətbiqin aktını əlavə etməli); bağlanmış xarici müqavilələr və ya beynəlxalq layihələr (kimlə bağlanmış, müqavilənin və ya layihənin nömrəsi, adı, tarixi və dəyəri); dövlət programlarında (dövlət orqanının adı, qərarın nömrəsi və tarixi); ixtira üçün alınmış patentlərdə (patentin nömrəsi, verilmə tarixi, ixtiranın adı); və digərlərində)

(burada doldurmali)

Layihənin nəticələrinin əməli (təcrübi) həyata keçirilməsi üçün müxtəlif fiziki-kimyəvi analiz metodlarının tətbiqi ilə aşağıdakı konkret məsələlər layihənin müvafiq mərhələlərində həll edilmişdir. İlk mərhələdə talliumun xalkohalogenidlərindən təşkil olunmuş üç- və dördkomponentli sistemlərdə yeni qeyri-stexiometrik fazaların axtarışı həyata keçirilmişdir. Bu mərhələdə $Tl-X-Hal$ ($X-S, Se, Te$; $Hal - Cl, Br, I$) və $Tl_2Te-TlHal-TlHal'$ ($Hal, Hal' - Cl, Br, I$) sistemlərində faza tarazlıqları geniş temperatur və qatılıq intervalında DTA, DSK, RFA, EHQ, mikroquruluş analizi və s. üsullarla tədqiq edilmiş, onların faza diaqramlarının bir sıra poli- və izotermik kəsikləri, likvidus səthlərinin proyeksiyaları qurulmuşdur. İkinci mərhələdə tədqiq edilən sistemlərdə aşkar edilən yeni fazaların kristalloqrafik və termodinamiki xassələri öyrənilmişdir. Kristalloqrafik tədqiqatlar RFA üsulu ilə Bruker D8 ADVANCED difraktometrində aparılmışdır. DTA (Termoskan-2 cihazı) və DSK (DSC 404 F1 Pegasus - cihazı) üsulları ilə isə aşkar edilən fazaların ərimə temperaturları və istilikləri, istilik tutumları təyin edilmişdir. Bu fazaların parsial və integral əmələgəlmə termodinamik funksiyaları isə EHQ üsulu ilə təyin edilmişdir.

Alınan nəticələr yeni aralıq fazaların sintezi və monokristal halında alınması metodikalarının işlənməsinə və optimal texnoloji şəraitlərin seçilməsinə imkan yaradır.

Daha sonra aşkar edilən yeni fazaların fərdi poli- və monokristallarının alınması üçün yeni üsul işlənib hazırlanmış və tətbiq olunmuşdur. Alınan nümunələr müasir eksperimental üsullarla xarakterizə edilmişdir.

Son mərhələdə alınmış yeni kimyəvi materialların müxtəlif fiziki-kimyəvi xassələri, o cümlədən Zeebek əmsali, istilik və elektrik keçiriciliyinin temperaturdan asılılığı və termo e.h.q. təyin edilmişdir.

Layihənin yerinə yetirilməsi nəticəsində talliumun xalkohalogenidləri əsasında yeni effektiv termoelektrik materialları, topoloji izolyatorlar və radiasiya detektorları alınmış, xarakterizə edilmiş və tətbiq üçün tövsiyyə edilmişdir.

Layihə dövründə alınmış elmi nəticələr 7 məqalə və 5 məruzə tezisində öz əksini tapmışdır.

2. Layihənin nəticələrindən gələcək tədqiqatlarda istifadə perspektivləri

1

Nəticələrin istifadəsi perspektivləri (fundamental, tətbiqi və axtarış-innovasiya yönü elmi-tədqiqat layihə və programlarında; dövlət programlarında; dövlət qurumlarının sahə tədqiqat programlarında; ixtira və patent üçün verilmiş ərizələrdə; beynəlxalq layihələrdə; və digərlərində)

(burada doldurmali)

Son dövrədə elmi-texniki tərəqqidə əldə edilən nailiyyətlər bəşər sivilizasiyası tarixində yeni dövr açmaqdadır. Bu misilsiz nailiyyətlər müxtəlif təyinatlı yeni funksional materialların

(yarımkeçircilərin, ifrat keçircilərin, superion keçircilərinin, termoelektrik, fotoelektrik materiallarının, detektorların və s.) tətbiqi ilə birbaşa bağlıdır. Hazırda topolji izolyatorlar adlanan yeni sinif laylı kristallik maddələr dünya alimlərinin diqqət mərkəzindədir. Topoloji izolyatorlar yaxın gələcəkdə elektron sənayesində tamamilə yeni dövr açacaqdır. Bu materiallar topoloji kvant kompüterlərin yaradılmasında istifadə olunacağı gözlənilir. Onların ferromaqnitlərə kombinasiyaları isə spin momenti əsaslı yeni maqnit yaddaş qurğularının, həmçinin yarımkəçircilərlə kombinasiyaları isə yeni tip ifratkeçirici və termoelektrik materialların yaradılmasında istifadə oluna bilərlər.

Alternativ və bərpa olunan enerji mənbələrindən istifadə edilməsi sahəsindəki uğurlar isə xeyli dərəcədə yeni fotoelektrik, termoelektrik və digər enerji çevirici materialların yaradılmasına əsaslanır. Ən müxtəlif mürəkkəb texnoloji proseslərin həyata keçirilməsinə, həmçinin yerde və atmosferdə ekoloji təhlükəsizliyə nəzarət yüksək həssaslığa malik sensor və detektorların yaradılmasını tələb edir.

Qeyd edilən və bir çox başqa sahələrdə tətbiq üçün perspektivli materiallar sırasında ağır metal xalkogenidləri və xalkohalogenidləri xüsusi yer tutur.

Qeyd edilən və oxşar birləşmələrin xassələrinin optimallaşdırılmasının ən rasional yollarından biri onlar əsasında yeni çoxkomponentli qeyri-stexiometrik fazaların alınmasıdır. Belə fazalarda tərkibin geniş intervalda dəyişdirilməsi mümkündür ki, bu da xassələrin optimallaşdırılması üçün çox mühümdür.

Təqdim edilən layihədə məhz bu istiqamətdə tədqiqatlar aparılmışdır. Layihənin əsas elmi ideyası praktiki tətbiq üçün perspektivli olan xalkohalogenid birləşmələrinin quruluş və tərkiblərinin mürəkkəbleşdirilməsi yolu ilə onların xassələrinin optimallaşdırılmasına nail olmaqdır. TI-X-Hal (X-S,Se,Te ; $\text{Hal} - \text{Cl,Br,I}$) və $\text{TI}_2\text{Te-TIHal-TIHal}'$ ($\text{Hal}, \text{Hal}' - \text{Cl,Br,I}$) sistemlərində izostruktur və ya oxşar quruluşlu üçlü birləşmələr əsasında geniş bərk məhlul sahələri aşkar edilmişdir ki, bu da komponentlərin nisbi qatılıqlarını dəyişməklə bərk məhlulların tətbiqi xassələrini yüksəltməyə imkan verir.

Layihənin yerinə yetirilməsi zamanı təklif və tətbiq olunan yeni monokristal yetişdirilməsi üsulu patent üçün perspektivlidir.

Layihə çərçivəsində (12 ay) tədqiq edilən sistemlərə aid alınmış nəticələr tamamilə yeni olub müxtəlif elektron-informasiya banklarına, həmçinin sorğu-məlumat kitablarına salına bilər. Aşkar edilmiş çoxkomponentli aralıq fazalar tərifimizdən ilk dəfə alınmışdır. Onlar fərdi şəkildə sintez edilmiş və müxtəlif tədqiqat üsulları ilə identifikasiya edilmişlər. Həmin fazaların kristalloqrafik, termodinamik və digər fiziki-kimyəvi parametrləri yeni olub müxtəlif elektron-informasiya banklarına, həmçinin sorğu-məlumat kitablarına salına bilər.

SİFARIŞÇI:

Elmin İnkışafı Fondu

Müşavir

Babayeva Ədilə Əli qızı

(imza)

"08" may 2015-ci il

Baş məsləhətçi

Daşdəmirova Xanım Faiq qızı

(imza)

"08" may 2015-ci il

İCRAÇI:

Layihə rəhbəri

Babanlı Dünya Məhəmməd qızı

(imza)

"08" may 2015-ci il



AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA ELMİN İNKİŞAFI FONDU

MÜQAVİLƏYƏ ƏLAVƏ

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Elmin İnkışafı Fondunun
elmi-tədqiqat programlarının, layihələrinin və digər elmi tədbirlərin
maliyyələşdirilməsi məqsədi ilə qrantların verilməsi üzrə
2013-cü il üçün 2-ci Gənc Alim və Mütəxəssislərin müsabiqəsinin
(EİF/GAM-2013-2(8)) qalibi olmuş və yerinə
yetirilmiş layihə üzrə

ALINMIŞ ELMİ MƏHSUL HAQQINDA MƏLUMAT (Qaydalar üzrə Əlavə 17)

Layihənin adı: Metal xalkohalogenidləri əsasında yeni çoxkomponentli funksional materialların
işlənilməsi

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: Babanlı Dünya Məhəmməd qızı

Qrantın məbləği: 8 000 manat

Layihənin nömrəsi: EİF/GAM-2-2013-2(8)-25/12/4-M-22

Müqavilənin imzalanma tarixi: 10 aprel 2014-cü il

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: 12 ay

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): 01 may 2014-cü il – 01 may 2015-ci il

Diqqət! Bütün məlumatlar 12 ölçülü Arial şrifti ilə, 1 intervalla doldurulmalıdır

1. Elmi əsərlər (sayı)

| № | Tamlıq dərəcəsi Elmi məhsulun növü | Dərc olunmuş | Çapa qəbul | Çapa göndərilmiş |
|----|---|--------------|-----------------------------|------------------|
| | | | olunmuş və ya çapda olan | çapda olan |
| 1. | Monoqrafiyalar həmçinin, xaricdə çap olunmuş | | | |
| 2. | Məqalələr həmçinin xarici nəşrlərdə | 1 | 2 | |
| 3. | Konfrans materiallarında məqalələr | 1 | 2 | 1 |

| | | | | |
|--|---|---|---|---|
| O cümlədən, beynəlxalq konfras materiallarında | | | | |
| 4. | Məruzələrin tezisləri | 1 | | |
| | həmçinin, beynəlxalq tədbirlərin toplusunda | | 3 | 1 |
| 5. | Digər (icmal, atlas, kataloq və s.) | | | |

2. İxtira və patentlər (sayı)

| Nö | Elmi məhsulun növü | Alınmış | Verilmiş | Ərizəsi verilmiş |
|----|---------------------------------|---------|----------|------------------|
| 1. | Patent, patent almaq üçün ərizə | | | |
| 2. | İxtira | | | |
| 3. | Səmərələşdirici təklif | | | |

3. Elmi tədbirlərdə məruzələr (sayı)

| Nö | Tədbirin adı (seminar, dəyirmi masa, konfrans, qurultay, simpozium və s.) | Tədbirin kateqoriyası (ölkədaxili, regional, beynəlxalq) | Məruzənin növü (plenar, dəvətli, şifahi, divar) | Sayı |
|----|---|--|--|------|
| 1. | “Fundamental və tətbiqi elmlərin (yer, texnika və kimya elmləri) aktual problemlərinin həllində multidissiplinar yanaşmanın rolu” adlı Gənc alim və mütəxəsislərin 1-ci Beynəlxalq Elmi Konfransı | Beynəlxalq | şifahi | 1 |
| 2. | | | | |
| 3. | | | | |

SİFARIŞÇI:
Elmin İnkişafı Fondu

Müşavir
Babayeva Ədilə Əli qızı

Ədil
(imza)
"08" 05 2015-ci il

Baş məsləhətçi
Daşdəmirova Xanım Faiq qızı

Xanım Faiq
(imza)
"08" may 2015-ci il

İCRAÇI:
Layihə rəhbəri
Babanlı Dünya Məhəmməd qızı

Məhəmməd
(imza)
"08" may 2015-ci il