



AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA ELMİN İNKİŞAFI FONDU

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Elmin İnkişafı Fondu
və Rusiya Fundamental Tədqiqatlar Fondunun
1-ci Azərbaycan-Rusiya birgə beynəlxalq qrant
müsabiqəsinin (EIF-BGM-4-RFTF-1/2017) qalibi olmuş
layihənin yerinə yetirilməsi üzrə
(rüblük olaraq 2-ci mərhələ)

ELMİ-TEXNİKİ HESABAT

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

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

Qrantın məbləği: 16 250 manat

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

Müqavilənin imzalanma tarixi: 15 fevral 2022-ci il

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: 18 ay

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

Layihənin II mərhələ üzrə (rüb) məbləği:

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

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

(burada doldurulmalı)

2-ci mərhələ üzrə alınan nəticələr. Tərkibində elementar yarımqeçirici 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 (E_g) əmələgəlməsinə (açılmasına) səbəb olur. Vakansiyasız Ge-dopinq edilmiş qrafendə qadağan olunmuş zonanın eni $E_g = 0.505$ eV-dır. Qrafendə bir vakansiya nəzərə alındıqda qadağan olunmuş zolağın eni $E_g = 0.21$ eV qədər azalır. Ge və/və ya Si atomlarının qrafen super qəfəslərinə daxil edilməsi nəticəsində karbon atomlarında lokal maqnit momentləri yaranır. Ge-dopinq edilmiş qrafendə, bir karbon vakansiyası yaxınlığında yaranan maqnit momenti $0.998 \mu_B$ - Bor maqnitonu, vakansiya olmayan qrafendəki lokal maqnit momentindən ($0.001 \mu_B$) böyükdür.

Eksperimental nəticələrə əsaslanıb müəyyən edilmişdir ki, hidrogenləşdirilmiş qrafenin (HGP) elektrik keçiriciliyi 4–125 K temperatur intervalında dəyişən hoppanma uzunluğuna malik olan yüklərin

ötürülmə mexanizminə uyğundur. HGP-də baş verən köçürmə prosesinin vacib fiziki parametrləri Mottun hoppanma mexanizmi modeli çərçivəsində hesablanmışdır.

Mono və divakansiyalı 18, 54 və 96 karbon atomlu qrafen super qəfəslərin maqnit xassələri hesablanmışdır. Maqnit momentin və qrafen super qəfəslərində vakansiyalar arasındakı məsafənin vakansiyaların qatılığından asılılığı tədqiq edilmişdir. Qrafen super qəfəslərindəki vakansiyaların əmələ gəlməsi enerjisi (E_V) hesablanmışdır. Defektəmələgəlmə enerjisinin qrafen kristalının deformasiyasından asılılığı hesablanmışdır. Qrafen monolaylarında karbon vakansiyaları nəticəsində yaranan lokal maqnit momentinin qiyməti hesablanmışdır. Vakansiyaları olan 18, 54 və 96 karbon atomlu qrafen super qəfəslərinin maqnit momentləri müvafiq olaraq 1.15, 1.33, 1.99 μ_B -dir.

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

(burada doldurmalı)

cari (2-ci) rüb üçün: 100 faiz

3 Hesabat dövründə alınmış **elmi nəticələr**, onların yenilik dərəcəsi

(burada doldurmalı)

Alınmış **elmi nəticələr** ilk dəfə bu layihə çərçivəsində alınıb və onların yenilik dərəcəsi dünya yeniliyi səviyyəsindədir.

Giriş

Yarımkəçiricilər sənayesinin uğurlu inkişafı inteqral sxemlərin məhsuldarlığının təkmilləşdirilməsindən və onların istehsal xərclərinin azaldılmasından asılıdır. Bu məsələ inteqral sxemlərin, məsələn, metal-oksit-yarımkəçirici sahə effektiv tranzistorun (MOSFET) aktiv materialının (blokunun) ölçüsünü azaltmaqla əldə edilir. MOSFET tranzistorların ölçülərinin azaldılmasını təmin etmək üçün yeni materiallar işlənir. Yeni qurğuların və planar tranzistorların ölçüsünü dəyişmək üçün germanium, III-V və III-VI birləşmələri və silisiuma alternativ olan materiallar istifadə edilə bilər. Layihənin bu mərhələsində aktual problem olan 2D quruluşlu qrafenlə bağlı bizim əldə etdiyimiz son nəzəri və eksperimental tədqiqatlara dair **elmi nəticələr** verilib.

2.1 Tərkibində 4p elementi saxlayan qrafen super qəfəslərin elektron quruluşunun modelləşdirilməsi

Nanoelektronika üçün vacib materialların quruluşunun nanoquruluş vəziyyətinə çevrilməsi, bu materialların fiziki xassələrində nəzərəcarpacaq dəyişikliklərə səbəb ola bilər [1-3]. Materialın səth sahəsinin onun həcminə nisbətində artımı və hissəciklərin kvant effektiv sahəyə köçürülməsi belə materialların, xüsusən də qrafenin (GP) fiziki xassələrinin dəyişməsində 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 miniatürləşdirilməsi 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, məsələn, legirləyici hissəciklərin (qatışıqlar, dopantların) tətbiq edilməsi.

Praktiki əhəmiyyətli qatışıqlara 4p elementləri, xüsusən də yarımkəçirici germanium və silisium daxildir. Məlum tədqiqatlarda tərkibində germanium olan qrafenin xassələrinə, dövrü cədvəlin 2p və 3p

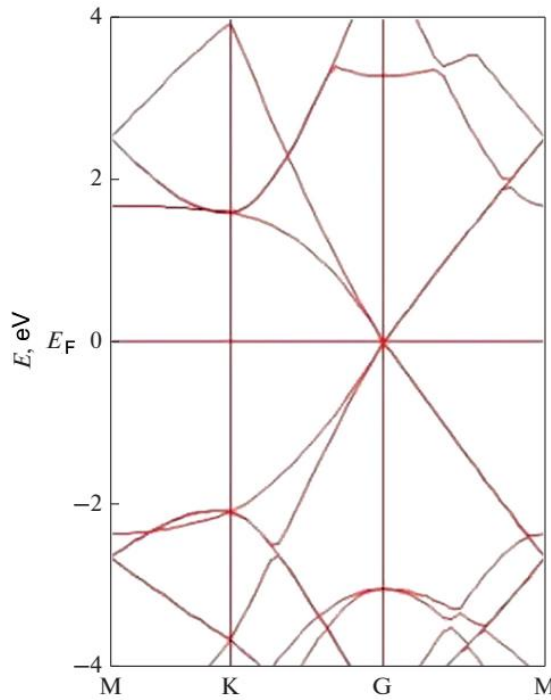
elementlərini ehtiva edən qrafendən daha az diqqət yetirilmişdir.

Yuxarıda göstərilənlər, qrafenin qadağan olunmuş zolağının enini açmaq və/və ya genişləndirməklə, qrafenin elektron xassələrinin dəyişdirilməsinə dopinqin təsirinin öyrənilməsinin vacib məsələ olduğu qənaətinə gəlməyə imkan verir.

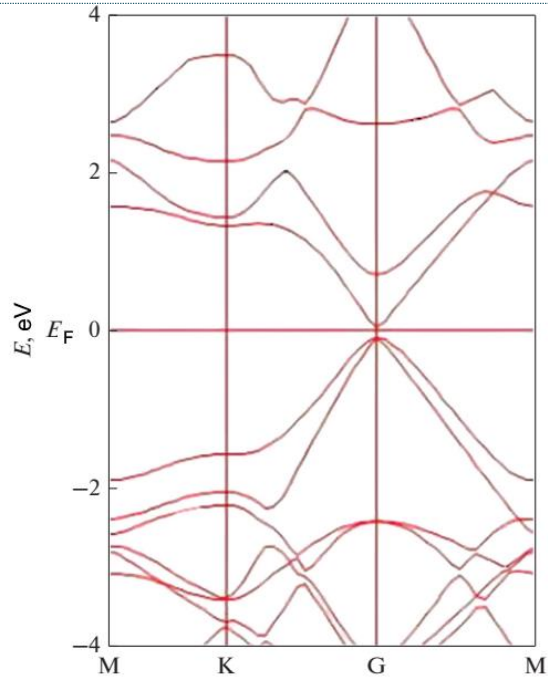
Ümumiləşdirilmiş gradient yaxınlaşdırması metodu çərçivəsində təməl prinsiplərdən sıxlıq funksional nəzəriyyəsinə (DFT - density functional theory) istifadə edərək, Ge və Si-doping edilmiş qrafenin 16 və 54 karbon atomlu superqəfəslərinin elektron və fiziki xüsusiyyətlərinə təsiri araşdırılmışdır. Digər məqsəd, hidrogenləşdirilmiş qrafendəki elektrik müqavimətin temperaturdan asılılığını təhlil etməkdir.

Ge və Si atomları ilə doping edilmiş 16 və 54 karbon atomlarından ibarət olan qrafen super qəfəslərinin monotəbəqələrinin elektron xassələri və enerji quruluşu sıxlıq funksional nəzəriyyəsi (DFT) əsasında araşdırılmışdır. Qrafen super qəfəslərin xassələri ümumiləşdirilmiş gradient yaxınlaşması (GGA - generalized gradient approximation) çərçivəsində öyrənilmiş və hesablanmışdır. Karbon atomlarının vakansiyası olduğu Ge-doping edilmiş qrafen super qəfəslərində antiferromaqnit spin nizamlanması aşkar edilmişdir. Karbon atomlarında meydana gələn lokal maqnit momentlərinin qiymətləri hesablanmışdır. Super qəfəslərin elektron hallarının sıxlığı (DOS - density of electronic states) və enerji zona quruluşu qiymətləndirilmişdir.

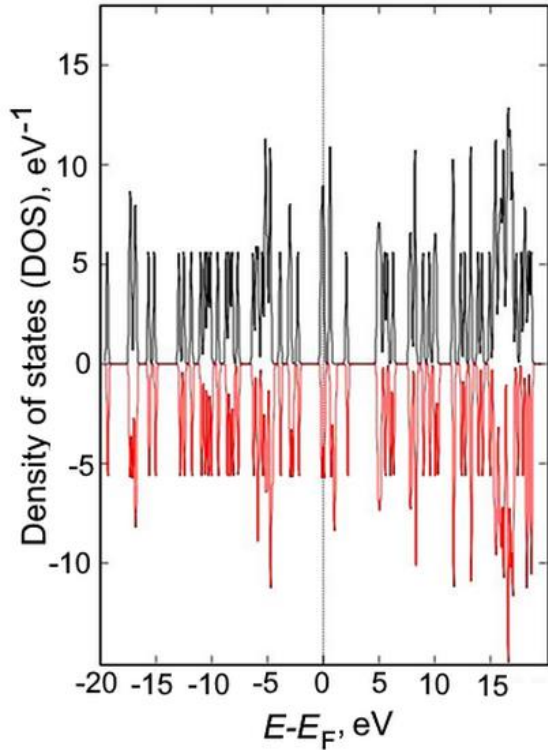
Qrafenin Ge ilə dopinq edilməsinin Si-dopinqlə müqayisədə, qrafendəki enerji boşluğunu nəzərəcərpacaq dərəcədə açdığı müəyyən edilmişdir. Elektron və zona quruluşu üçün aldığımız əsas qanunauyğunluqlar **şəkil 1-4**-də göstərilmişdir.



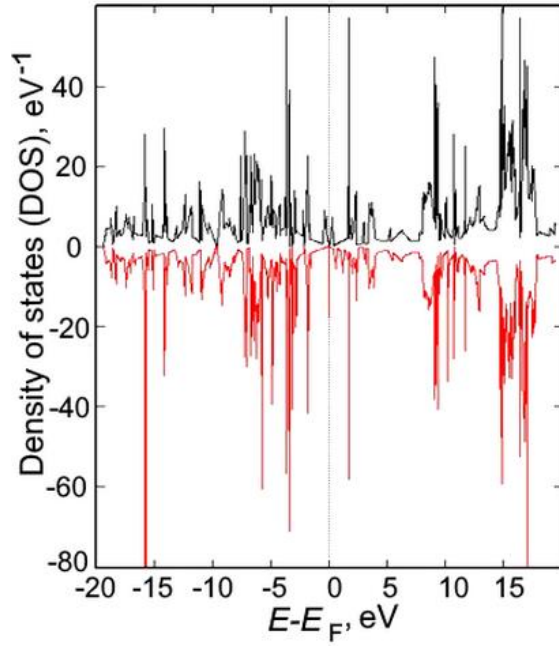
Şəkil 1. 16 karbon atomlu qrafen monotəbəqəli superqəfəsin zona quruluşu.



Şəkil 2. 16 karbon atomundan ibarət Si-doping edilmiş qrafen monotəbəqənin zona quruluşu.

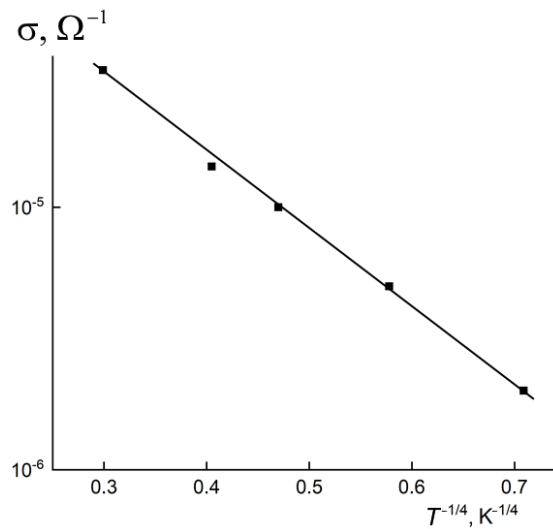


Şəkil 3. 16 karbon atomu olan bir vakansiyası olan Ge-doping edilmiş qrafen superqəfəsin elektron halının (DOS) ümumi sıxlığı. Enerjinin sıfır qiyməti Fermi səviyyəsində götürülmüşdür, panelin yuxarı yarısı spin yuxarı vəziyyətini, alt yarısı isə spin aşağı vəziyyətini ifadə edir.



Şəkil 4. 54 karbon atomu və bir vakansiyası olan Ge-doping edilmiş qrafen superqəfəsin elektron halların (DOS) ümumi sıxlığı. Enerjinin sıfır qiyməti Fermi səviyyəsində götürülmüşdür, panelin yuxarı yarısı spin yuxarı vəziyyətini, alt yarısı isə spin aşağı vəziyyətini ifadə edir.

Hidrogenləşdirilmiş qrafenin (HGP) elektrik keçiriciliyinin temperaturdan asılılığı nəzərə alınmaqla yüklərin ötürülməsinin fiziki qanunları öyrənilmişdir. Mottun “hoppanma” modeli çərçivəsində Müəyyən edilmişdir ki, 4–125 K temperaturda HGP qrafenin elektrik keçiriciliyi dəyişən atlama uzunluğuna malik olan yük ötürmə mexanizminə uyğundur. Bu medələ uyğunluq **şəkil 5**-dən görünür.



Şəkil 5. Mottun “hoppanma” modeli çərçivəsində qurulmuş hidrogenləşdirilmiş qrafenin aşağı temperatur keçiriciliyi qrafiki.

HGP qrafenin energetik zonasında Fermi səviyyəsinə yaxın olan lokal vəziyyətlərin sıxlığı, atlama məsafəsi və Fermi səviyyəsinə yaxın olan “tələyə” düşmüş vəziyyətlərin enerji yayılması müəyyən edilmişdir. HGP qrafenin qadağan olunmuş zonasında lokalizasiya edilmiş halların qatılığı (konsentrasiyası) hesablanmışdır.

2.2 Nəticələr

16 və 54 karbon atomlu Ge və Si-doping edilmiş qrafen (GP) super qəfələrinin tarazlıq atom və zona quruluşunun DFT hesablamaları onların stabilliyini göstərir. Qrafen monolaylarına Ge və Si-doping edilməsi, qrafenin qadağan olunmuş enerji boşluğunun (zona) açılmasına gətirib çıxarır. Vakansiyasız Ge-doping edilmiş qrafendə zona boşluğu $E_g = 0.505$ eV-dir.

Bir vakansiya nəzərə alındıqda qadağan olunmuş zolağın eni $E_g = 0.21$ eV qədər azalır. Yaranan yüklərin töhfələrini xarakterizə edən Ge və Si-doping edilmiş qrafen super qəfələri üçün hesablanmış elektron hallarının sıxlıqları da energetik zonada nəzərəcarpacaq enerji boşluğunun meydana gəldiyini göstərir.

Ge və / və ya Si atomlarının qrafen super qəfələrinə daxil edilməsi zamanı karbon atomlarında lokal maqnit momentlərinin yaranmasına səbəb olur. Doping edilmiş qrafenin zona quruluşunun dəyişdirilməsi ilə enerji boşluğunda karbon atomlarının ferromaqnit vəziyyəti yaranır. Qrafen monolaylarındakı müxtəlif karbon atomlarında formalaşan lokal maqnit momentlərinin qiyməti onların bir-birindən fərqləndiyini və ferromaqnit-antiferromaqnit nizamlığının olduğunu göstərir. Ge-doping edilmiş qrafendə, məsələn, bir karbon vakansiyası yaxınlığında yaranan karbonun maqnit momenti ($0.998 \mu_B$), vakansiya olmayan qrafen karbondan ($0.001 \mu_B$) daha böyükdür.

Hidrogenləşdirilmiş qrafenin (HGP) elektrik keçiriciliyi 4–125K temperaturda dəyişən hoppanma uzunluğuna malik olan yüklərin ötürülmə mexanizminə uyğundur. HGP-də Fermi səviyyəsinə yaxın olan lokal halların sıxlığı müəyyən edilmişdir: $N_F = 2 \cdot 10^{21} \text{ eV}^{-1} \cdot \text{sm}^{-3}$. HGP-də hesablanan hoppanma məsafəsi 64 \AA və Fermi səviyyəsinə yaxın olan “tələlərdəki” halların enerji yayılması $\Delta E = 1$ meV-dir. ΔE qiyməti, HGP-də hoppanma (ΔW) üçün hesabladığımız aktivasiya enerjisinin qiymətinə $\Delta W = 0.8$ meV uyğundur. HGP-nin qadağan olunmuş zonasındakı lokallaşmış halların hesablanan qatılığı $N_t = 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ -dir.

Karbon vakansiyalarının qrafenin monolayına daxil edilməsi zamanı lokal maqnit momentinin meydana gəlməsinə səbəb olur. Tərkibində 18, 54 və 96 karbon atomu olan mono və divakansiyalı qrafen super qəfələri üçün maqnit momentinin qiymətinin müxtəlif faktorlardan asılılığı tədqiq edilmişdir. 96 karbon atomu olan GP super qəfəsdə maqnit momentinin qiymətinin vakansiyalara həm yaxın, həm də uzaqda yerləşən halların spin sıxlığının lokalizasiya sahəsi müəyyən edilmişdir. GP-də vakansiyalar arasındakı məsafənin qrafen super qəfələrinə yaranan maqnit momentinin qiymətinə təsiri öyrənilmişdir. Maqnit momentin və 96 atomlu qrafen super qəfələrinə vakansiyalar arasındakı məsafənin vakansiyaların qatılığından asılılığı öyrənilmişdir. Qrafen super qəfələrinə vakansiyaların əmələ gəlməsi enerjisi (E_V) hesablanmışdır. E_V -nin qiymətinin qrafen kristallının qəfəsinin deformasiyasından asılılığı hesablanmışdır.

2.3 Qrafendə nizamlanmış vakansiyaların xassələri

Qısa məsafəli nizamlanmış quruluşla əlaqəli vakansiyaların qrafen monolayının maqnit xassələrinə təsiri nəzəri olaraq öyrənilmişdir. Nizamlanmış vakansiyalı olan qrafenin xassələrinin hesablanması nəticələrini nəzərdən keçirək. Bu vəziyyətdə, spinə görə polyarizə olunmuş maqnit momentli karbon atomunun vakansiya halı nəzərə alınıb.

Qradyent yaxınlaşmasında spin-polyarizasiyası sıxlıq funksional nəzəriyyəindən istifadə edilmişdir. Hesablamalar, Atomistix Tool Kit (ATK) proqram paketi vasitəsi ilə potensial üsulla aparılmışdır. Hesablamalarda Purd-Burk-Ernzerhof funksional (PBE funksional) Generalize Gradient Approximation (GGA) şəklində ümumiləşdirilmiş gradient yaxınlaşmasından istifadə edilmişdir.

GGA metodundan istifadə edərkən qrafen superqəfəsin enerjisinə baxılarkən, elektronun spini və sıxlıq qradyenti nəzərə alınmışdır:

$$E_{XC}^{GGA}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}] = \varepsilon_{XC}^{GGA}(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}, \vec{\nabla}n_{\uparrow}, \vec{\nabla}n_{\downarrow})n(r)d^3r \quad (1)$$

harada ε_{XC}^{GGA} – sabit sıxlığı olan super qəfəsin mübadilə-korrelyasiya enerjisidir ki, o lay arasındakı məsafədən d asılı olaraq sabit sıxlığa malik olur (r).

Qrafenin qeyri-bərabər maqnit konfigurasiyasının xassələri mono- və divakansiyalar nəzərə alınmaqla hesablanmışdır. Kanonik statistik cəmi (S), qrafen sisteminin n -ci konfigurasiyasının ümumi enerjisi ilə sistemin əsas haldakı enerjisi arasındakı fərqdən hesablanır:

$$S = \sum_{n=1}^5 \exp(-(E_n - E_0)/(k_B T)),$$

burada E_n – n -ci enerji vəziyyətindəki sistemin ümumi enerjisidir, E_0 – sistemin əsas halının enerjisidir, k_B – Boltzmann sabitidir, $T = 1400$ K (qrafenin mövcudluğunun orta temperaturu).

Qrafendə maqnit halının olma ehtimalı, virtual nöqtəvi defektin (vakansiya) S_n statistik cəmə (S) töhfəsinin nisbəti ilə hesablanmışdır: $P_n = S_n/S$. Beləliklə, maqnit momentinin (M) orta qiymətinə nəzərən bir və ya iki vakansiyası olan qrafen superqəfəsin ümumi enerjisi hesablanmışdır: $\langle E \rangle = \sum_n E_n P_n$.

Həm mono-, həm də divakansiyaları olan super qəfələrdə, vakansiyaların qrafenin deformasiyasına (sıxılma-dartılma) təsirinin asılılığı tədqiq edilmişdir. Kvadrat görünüşlü səthdə iki ölçülü superqəfəsdən istifadə edilmişdir. Super qəfəsin belə forması, periodik bağlı olan düzbucaqlı qrafenin elementar qəfələrindən qurulmuşdur. Bu, qəfəsin formasının deformasiyaya təsirini azaltmağa, eləcə də qrafen monolaylarının xassələrinin defektlər arasındakı məsafədən asılılığını qurmağa imkan verir.

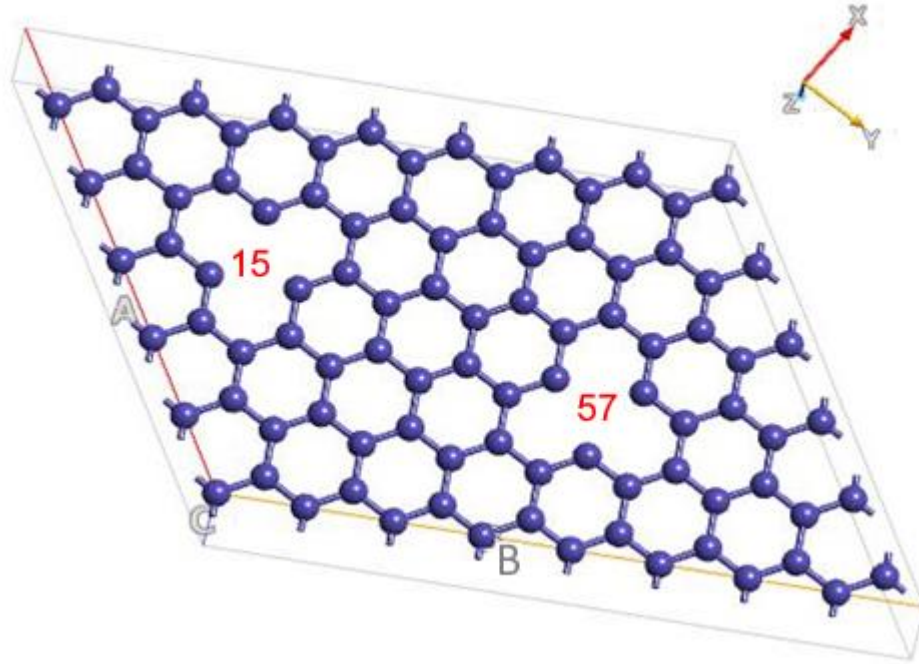
Qrafenin kristal qəfəsinin deformasiya dərəcəsi x və y istiqamətlərdəki tensor komponentləri nəzərə alınmaqla modelləşdirilmişdir. İlkin vəziyyətə gəldikdə, superqəfəsin x və y koordinatları boyunca uyğun olaraq -2.5% və 2.5% deformasiya edilmişdir.

DFT əsasında 18, 54 və 96 atomlu qrafen super qəfələrinin lokal maqnit momentləri hesablanmışdır və uyğun qiymətlər alınmışdır: 1.15, 1.33, 1.99 μ_B . Bu maqnit momentlərinin qiymətləri hesablama yolu ilə əldə edilən ədəbiyyat məlumatları ilə [4-8] müqayisə edilmişdir (**Cədvəl 1**).

Cədvəl 1. Qrafen super qəfələrindəki maqnit momentlərinin (M , μ_B) DFT-hesablanmış qiymətlərinin ədəbiyyat məlumatları ilə müqayisəsi

M, μ_B	
Bizim hesablama	ədəbiyyat
1.15	1.5, 1.7, 2 [4]
1.33	1.04 [5]
1.4	1.12–1.5 [6]
1.99	2 [7]
	1.7–2 [8]

Superqəfəsdə yaxınlıqdakı karbon atomlarının qrafen monolaylarından "çıxarıldığı" hala baxılmışdır. 96 atomlu qrafen superqəfəsi tədqiq edilmişdir (**Şəkil 6**).



Şəkil 6. x, y, z koordinat oxları boyunca nizamlanmış vakansiyaları olan 96 karbon atomlu qrafen superqəfəsin sxemi (vakansiyalar 15 və 57-ci karbon atomlarıdır).

Biri-birinə yaxın yerləşən vakansiyaları olan 96 karbon atomlu super qəfəsdə, maqnit momenti daha böyük olur: məsələn, $V_C 35$ и $V_C 39$ ($1.99 \mu_B$), $V_C 15$ и $V_C 57$ ($1.15 \mu_B$), həmçinin $V_C 36$ и $V_C 52$ ($1.33 \mu_B$).

Qrafen superqəfəsində spin sıxlığının lokalizasiya sahəsi (ρ_s) öyrənilmişdir: (ρ_s): $\rho_s = \rho_{s\uparrow} - \rho_{s\downarrow}$, burada $\rho_{s\uparrow}$ və $\rho_{s\downarrow}$, müvafiq olaraq elektronların paylanma sıxlığıdır: spin yuxarı ($+1/2\hbar$) və spin aşağı hal ($-1/2 \hbar$).

Şəkil 7-də maqnit momentinin qtlıq paylanmasının 96 atomlu qrafen super qəfəsindəki vakansiyalar arasındakı məsafədən asılılıqları göstərilmişdir.

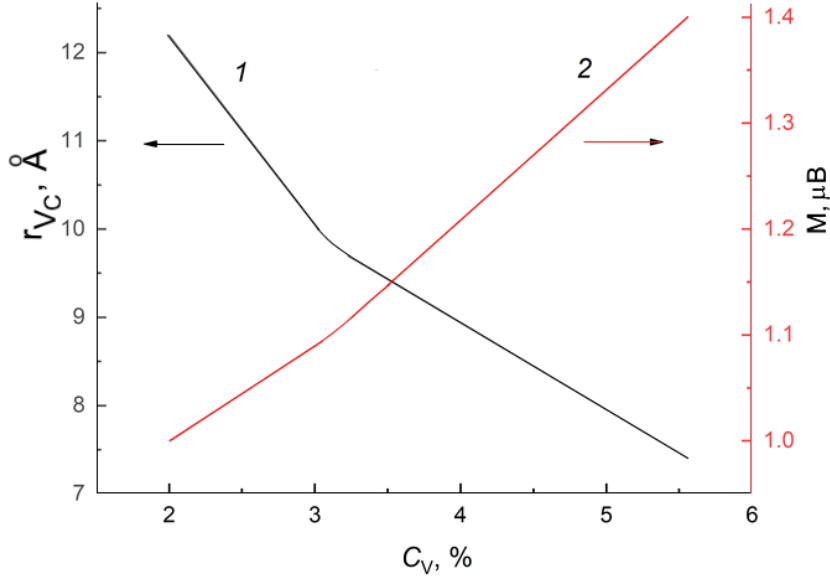
Vakansiyaların konsentrasiyasının artması onların aralarındakı məsafənin azalmasına və maqnit momentinin xətti artmasına səbəb olur. Vakansiya saxlayan 96 karbon atomlu grafendə maqnit momentinin vakansiyalar arasındakı məsafədən asılılığı **şəkil 8-də** göstərilmişdir.

96 atomlu grafendəki vakansiyalar arasındakı məsafənin azalması ilə maqnit momenti artır və r_{V_C} qiymətləri 10 Å-dan aşağı olduqda bu artım daha da dik olur. Qrafendəki karbon atomları üçün mono və divakansiyaların əmələ gəlməsi enerjisi (E_f) bu düsturla hesablanmışdır:

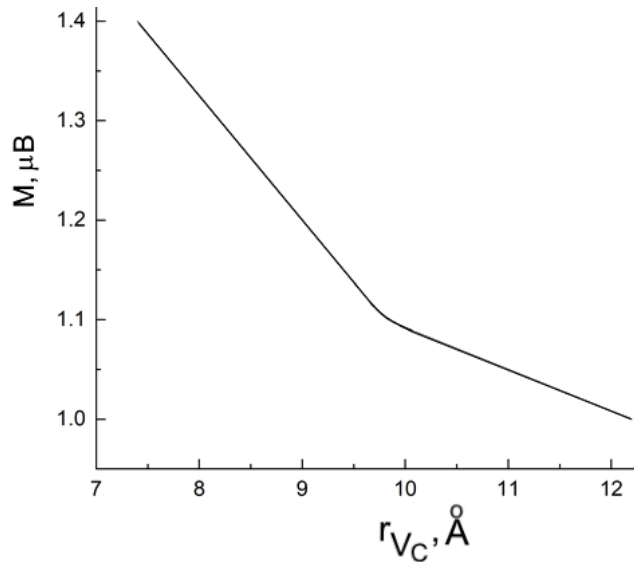
$$E_f(SV_C) = E_{\text{tot}}^V(SV_C) - E_{\text{tot}}^{\text{gp}} + \mu_C \quad (2)$$

$$E_f(SV_C) = E_{\text{tot}}^V(DV_{C_1C_2}) - E_{\text{tot}}^{\text{gp}} + \mu_{C_1} + \mu_{C_2} \quad (3)$$

burada $E_f(SV_C)$ karbon üçün (V_C) monovakansiyaların əmələ gəlməsi enerjisidir, $E_{\text{tot}}^V(DV_{C_1C_2})$ və $E_{\text{tot}}^{\text{gp}}$ divakansiyaları olan və olmayan qrafenin ümumi enerjisidir, μ_C kimyəvi potensialdır; karbon atomlarının ən sabit modifikasiyası (qrafit) üçün $C-[He]2s^22p^2$.



Şəkil 7. Vakansiyalar ehtiva edən 96 atomlu qrafen monolayının super qəfəsindəki vakansiyalar arasındakı məsafənin (əyri 1) və maqnit momentinin konsentrasiya asılılıqları (əyri 2).



Şəkil 8. 96 karbon atomlu qrafen monolayının super qəfəsindəki lokal maqnit momentinin vakansiyalar arasındakı məsafədən r_{V_C} asılılığı.

Vakansiya yaradılarkən çıxarılmış müvafiq karbon atomunun i kimyəvi potensialı μ_{C_i} aşağıdakı kimi müəyyən edilir:

$$\mu_{C_i} = E_{\text{tot}}^{\text{SP}} - (E_{V_C}^{\text{u.c.}}/2) \quad (4)$$

burada $E_{\text{tot}}^{\text{u.c.}}$ qrafenin elementar qəfəsin ümumi enerjisidir, $E_{V_C}^{\text{u.c.}}$ vakansiyası olan karbonun stabil fazası üçün elementar qəfəsin enerjisidir.

DFT- PBE məlumatlarına əsaslanaraq, mono və divakansiyanın əmələ gəlməsi enerjisi üçün müvafiq olaraq 7.3 və 7.2 eV alınmışdır.

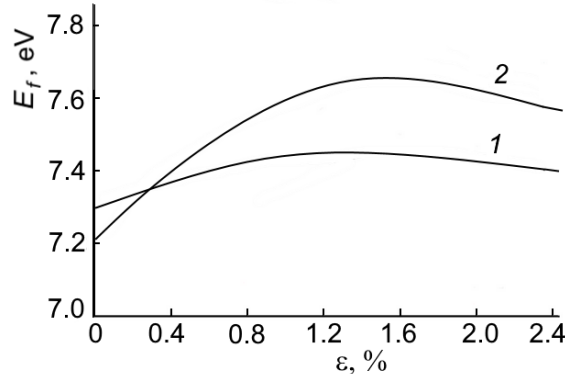
Qrafendəki karbonla əlaqədar mono və divakansiyanın əmələ gəlməsinin hesablanmış enerjiləri məlum məlumatlar ilə üst-üstə düşür (**Cədvəl 2**).

Cədvəl 2. Qrafen super qəfəsində vakansiyanın əmələgəlmə enerjisinin (eV) DFT-PBE metodu ilə hesablanmış qiymətlərinin ədəbiyyat məlumatları ilə müqayisəsi

əmələgəlmə enerjisi $E_f^{V_C}$, eV	
SV_C	DV_C
7.3	7.2
7.3–7.5 [9]	7.2–7.9 [9, 10]
7.5 [11]	7.47 [11]

Qrafenin kristal qəfəsinin təkoxlu deformasiyasının (ϵ) karbon atomlarının vakansiyalarının əmələ gəlməsi enerjisinə təsiri araşdırılmışdır. 96 atomdan ibarət bir qrafen kristalının xassələrini modelləşdirmək üçün hesablama blokunda mono və divakansiya yaradılmışdır. Karbon atomunun vakansiyasının əmələgəlməsi enerjisinin qrafen qəfəsinin deformasiyasından asılılığı təsvir edilmişdir.

Şəkil 9-da vakansiyaların əmələgəlmə enerjisinin qrafenin kristal qəfəsinin deformasiyasından asılılığı $E_f^{V_C} = f(\epsilon)$ göstərilmişdir.



Şəkil 9. 96 atomlu qrafen super qəfəsində karbon vakansiyalarının əmələ gəlməsi enerjisinin kristal qəfəsinin tək oxlu deformasiyasından asılılığı. 1 - monovakansiyalı qrafen; 2 - divakansiyalı qrafen. Kristal qəfəsin deformasiyası vakansiyanın yaranma istiqamətinə perpendikulyar haldadır.

Mono və divakansiyası olan grafenlər üçün deformasiya zamanı vakansiyaların yaranma enerjisi azalır. Müxtəlif vakansiyaların C atomları ilə qarşılıqlı təsir potensialı nəzərəçarpacaq qədər enerji dəyişikliyi ilə fərqlənir.

Şəkil 9-da qəfəsin dartılması vakansiyanın istiqamətinə perpendikulyar olaraq götürülmüşdür. Hesablanmış $E_f^{Vc} = f(\varepsilon)$ asılılıqlardan görünür ki, deformasiya monovakansiyaların yaranma enerjisine zəif təsir göstərir. Qrafen qəfəsinin deformasiyası zamanı monovakansiyalı qrafen nisbətən stabildir (əyri 1).

Deformasiyanın artması ilə divakansiyalı qrafenin kristal qəfəsinin dayanıqlığı artır (əyri 2). Göründüyü kimi, grafenin deformasiyası zamanı C atomlarının divakansiyalarının yaranma enerjisi monoton olaraq azalır.

Beləliklə müəyyən edilmişdir ki, monovakansiyalı və divakansiyalı grafenlər üçün (1 və 2 əyri) qəfəsin deformasiyasının oxşar asılılıqları $E_f^{Vc} = f(\varepsilon)$ bu asılılıqların təbiətinə az təsir göstərir. Qrafendəki karbon vakansiyalarının sayı aşağıdakı düsturla müəyyən edilmişdir:

$$n_{Vc}^{gp} = \exp\left(-E_f^{Vc}/k_B T\right),$$

burada n_{Vc}^{gp} – qrafen monolayındakı vakansiyaların sayıdır; E_f^{Vc} – qrafen monolayındakı karbon vakansiyalarının əmələ gəlməsi enerjisidir; T – temperaturdur.

2.4 Nəticələr

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 qəfələrinin maqnit momentləri müvafiq olaraq 1.15, 1.33, 1.99 μ_B -dir. Bu işdə qrafen superqəfələri 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 μ_B и 1.4 μ_B -dir. Spin yuxarı vəziyyəti ilə müqayisədə, spin aşağı vəziyyətin əmələ gəlmə enerjisi 0.02 eV azdır.

GP səthində vakansiyalar arasındakı 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 arası 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-dır. Vakansiyaların hesablanan əmələgəlmə enerjilərinin qiymətləri ədəbiyyatla uyğunlaşır.

Ədəbiyyat siyahısı

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>
4. Chen J.-J.; Wu H.-C.; Yu D.-P.; Liao Z.-M. (2014). Magnetic moments in graphene with vacancies. Nanoscale, 2014. 6(15), 8814. <https://doi.org/10.1039/c3nr06892g>
5. Yuchen Ma, P.O. Lehtinen, A.S. Foster, R.M. Nieminen. Magnetic properties of vacancies in graphene and single-walled carbon nanotubes // New J. Phys. 2004. 6, 68,1. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/6/1/068>
6. Yazyev, O.V; Helm, L. Magnetism induced by single-atom defects in nanographites. Journal of Physics: Conference Series, 2007. 61(1), P. 1294–1298. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/61/1/255>
7. Ramasubramaniam A, Medhekar N.V, Shenoy, V.B. Substrate-induced magnetism in epitaxial graphene buffer layers. Nanotechnology, 2009. 20(27), 275705–. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/27/275705>
8. Nanda B.R.K., Sherafati M., Popović Z.S., Satpathy S. Electronic structure of the substitutional vacancy in graphene: density-functional and Green's function studies // New J. Phys. 2012. 14 083004.2012. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/14/8/083004>
9. El-Barbary A.A.; Telling R.H.; Ewels C.P.; Heggie M.I.; Briddon P.R. Structure and energetics of the vacancy in graphite. Physical Review B, 2003. 68(14), P. 144107. <https://doi.org/10.1103/physrevb.68.144107>
10. Krasheninnikov A.V.; Lehtinen P.O.; Foster A.S.; Nieminen R.M. Bending the rules: Contrasting vacancy energetics and migration in graphite and carbon nanotubes // Chem. Phys. Lett. 2006. 418, 1-3, 132–136 (2006). <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.10.106>
11. Banhart F.; Kotakoski J.; Krasheninnikov A.V. Structural Defects in Graphene. ACS Nano. 2011. 5(1), P. 26–41. <https://doi.org/10.1021/nn102598m>

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), ümumiləşdirilmiş gradient yaxınlaşması (GGA), 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) *(sürətlərini əlavə etməli!)*

	<p><i>(burada doldurulmalı)</i> Xaricdə (İmpakt-faktorlu jurnalda) 2 məqalə dərc edilib</p> <p>1. Асадов М.М., Мустафаева С.Н., Гусейнова С.С., Лукичев В.Ф., Тагиев Д.Б. Моделирование структурных и энергетических характеристик атомов в 2D-кристалле GaS с точечными дефектами // <i>Физика твердого тела</i>. 2022. Том 64. Вып. 1. С. 46-59. https://doi.org/10.21883/FTT.2022.01.51830.182. http://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/51830</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. https://doi.org/10.1134/S1063739722010024</p>
6	<p>İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər</p> <p><i>(burada doldurulmalı)</i> Yox</p>
7	<p>Layihə üzrə ezamiyyətlər</p> <p><i>(burada doldurulmalı)</i> Yox</p>
8	<p>Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak</p> <p><i>(burada doldurulmalı)</i> Yox</p>
9	<p>Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak</p> <p><i>(burada doldurulmalı)</i> Yox</p>
10	<p>Layihə mövzusu üzrə elmi məruzələr (seminarlar, konfranslar, dəyirmi masalar və s. çıxışlar)</p> <p><i>(burada doldurulmalı)</i> Yox</p>
11	<p>Layihə üzrə əldə olunmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar</p> <p><i>(burada doldurulmalı)</i> Yox</p>
12	<p>Yerli həmkarlarla əlaqələr</p> <p><i>(burada doldurulmalı)</i> Layihə üzrə yerli həmkarlarla cari ildə 2 məqalə dərc edilib (https://doi.org/10.1134/S1063739722010024, https://doi.org/10.1134/S1063739722010024)</p>
13	<p>Xarici həmkarlarla əlaqələr</p> <p><i>(burada doldurulmalı)</i> Layihə üzrə xarici həmkarlarla cari ildə 2 məqalə dərc edilib (https://doi.org/10.1134/S1063739722010024, https://doi.org/10.1134/S1063739722010024)</p>
14	<p>Layihə mövzusu üzrə kadr hazırlığı</p> <p><i>(burada doldurulmalı)</i> Yox</p>

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 _____

QEYD: bütün hallarda uyğun olan bəndlər doldurulmalıdır.