



## AZƏRBAYCAN ELM FONDU

**Azərbaycan Elm Fondu və Rusiya Fundamental  
Tədqiqatlar Fondunun 1-ci Azərbaycan-Rusiya  
birgə beynəlxalq qrant müsabiqəsinin  
(EIF-BGM-4-RFTF-1/2017) qalibi olmuş  
layihənin yerinə yetirilməsi üzrə  
(rüblük olaraq 5-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-cü il**

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

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

- 1 Layihənin həyata keçirilməsi üzrə cari rübdə yerinə yetirilmiş **elmi işlər** (burada doldurmalı)  
Laylı quruluşlu yarımkeçirici TlInS<sub>2</sub> birləşməsinin monoklinik sinqoniyasının (fəza qrupu C2/c) 2 × 2 × 2 superqəfəsləri qurulmuş və tərkibində 32 atom olan TlInS<sub>2</sub>< Yb> birləşməsindən istifadə edilmişdir. Sıxlıq funksional nəzəriyyəsi (DFT) istifadə edərək, TlInS<sub>2</sub>< Yb> birləşməsinin elektron zolağının strukturu və əmələ gəlmə enerjisi (entalpiyası) hesablanmışdır. DFT hesablamalarında Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) sxemindən və lokal spin sıxlığı yaxınlaşmasından (LSDA), və həmçinin mübadilə-korrelyasiya funksionalını korrekte etmək üçün ümumiləşdirilmiş qradient yaxınlaşmasından (GGA) istifadə edilmişdir. Hesablamalar üçün tərtib edilmiş TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub>< Yb> superqəfəslərin atom quruluşu həndəsi optimallaşdırılmış və onların üzərində elektron halın xassələri hesablanmışdır. İtterbium TlInS<sub>2</sub> kristalının elektron strukturuna güclü təhriflər gətirmir ki, bu da əvəz edilmiş indiumun ion radiusunun və doping itterbium ionunun yaxınlığı ilə bağlıdır. İtterbium atomunun quruluşa daxil olması ilə əlaqədar TlInS<sub>2</sub> kristalının keçiricilik elektron zolağında əhəmiyyətli fiziki dəyişikliklər baş

vermir və energetic zolağın strukturu həcmi TlInS<sub>2</sub> kristalı üçün xarakterik olan inversiya strukturunu saxlayır. DFT GGA PBE hesablamaları həm TlInS<sub>2</sub>, həm də TlInS<sub>2</sub>< Yb> üçün aparılmış və müqayisəli təhlil edilmişdir. Hər iki quruluş üçün qadağan olunmuş zolağın eninin qiymətləndirilməmiş qiymətləri aşağı kəmiyyətlər verir. Bu mübadilə-korrelasiya funksionalının hesablamalarında iki müxtəlif forma seçimi (LDA və ya GGA) ilə bağlıdır. TlInS<sub>2</sub> (f.q. C2/c) kristalının əmələ gəlmə enerjisi (entalpiyası) hesablanmışdır  $H^0 = -237.15$  kJ/mol.

TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub> <1 at.% Yb> polikristalları sintez edilmiş və onlardan Bridgman-Stokbarger üsulu ilə monokristal nümunələri yetişdirilmişdir. TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> nümunələrinin kristal qəfəs parametrləri rentgen faza analizi ilə müəyyən edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, TlInS<sub>2</sub> əsasında yetişdirilmiş monokristal nümunələri C2/c-C<sub>2h</sub><sup>6</sup> fəza qrupuna və laylı monoklinik sinqoniyaya malikdirlər. Laylı quruluşlu TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristal nümunələrində laylar üzrə tezliyin dispersiyası tədqiq edilmişdir. Dəyişən elektrik sahələrində (ac keçiricilik –  $\sigma_{ac}$ ) keçiricilik, kompleks nüfuzluğun və nüfuzluğun dielektrik itkisinin tangensi ( $tg\delta$ ), real ( $\epsilon''$ ) və xəyali ( $\epsilon'$ ) komponentləri  $f = 5 \times 10^4 - 3.5 \times 10^7$  Hz tezlik diapazonunda tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, TlInS<sub>2</sub>-nin kristal qəfəsində indiumun iterbiylə (1 at.%) qismən əvəzlənməsi  $\epsilon''(f)$  və  $\epsilon'(f)$  dispersiya əyrilərinin modifikasiyasına gətirib çıxarır. Tədqiq edilən  $f = 5 \times 10^4 - 2.4 \times 10^7$  Hz tezlik diapazonunda TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristalın dəyişən cərəyan keçiriciliyi  $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$  qanunauyğunluğuna tabe olur. Kəmiyyətlərin yarımkəçiricilərdə belə bir qanunauyğunluğu Fermi səviyyəsinə yaxın olan lokallaşdırılmış hallar vasitəsilə yüklərin ötürülməsinin “hoppanma” mexanizmi üçün xarakterikdir. Dəyişən cərəyanda TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> Fermi səviyyəsinə yaxın olan halların sıxlığı və enerji yayılması qiymətləndirilmişdir. Bundan əlavə yükdaşıyıcıların “hoppanmasının” orta vaxtı və məsafəsi, keçiriciliyə cavabdeh olan “tələlərin” konsentrasiyası hesablanmışdır.

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

TlInS<sub>2</sub> birləşməsi yarımkəçirici üçlü birləşmələrin IIIBIIICVI ailəsinə aiddir. Bu kristal materiallar yarımkəçirici və ferroelektrik xüsusiyyətlərə malikdir və görünən və orta infra qırmızı (IR) diapazonlarında fotodetektorlar üçün aktiv mühit kimi istifadə edilə bilər [1]. TlInS<sub>2</sub> birləşməsinin kristal quruluşu müxtəlif polimorf modifikasiyaların əmələ gəlməsi ilə xarakterizə olunur: monoklinik [2, 3], ortorombik [2], tetraqonal [4], heksaqonal (altıbucaqlı) [5] və triklinik sistemlər [6].

TlInS<sub>2</sub> monoklin sinqoniyaya (fəza qrupu C2/c) malik birləşmə olub laylı quruluşa malikdir və fiziki xassələrin anizotropiyası ilə xarakterizə olunur. TlInS<sub>2</sub> kristallarının xassələrinə, xüsusən də dopinq elementlərinin atomları güclü təsir göstərir [7]. Yarımkəçiricilər üçün dopinq elementlərindən biri

lantanidlərdir [8].

Bununla belə, lantanid dopinqinin TlInS<sub>2</sub>-nin elektron strukturuna və fiziki xassələrinə təsiri kifayət qədər öyrənilməmişdir. Məsələn, electron konfigurasiyasında doldurulmamış 4f və 5d təbəqələri olan lantanidlər TlInS<sub>2</sub> kristallarının strukturuna və xassələrinə təsir göstərə bilər.

Bu mərhələdə aparılan tədqiqatın məqsədi sıxlıq funksional nəzəriyyəsi (DFT) üsulu ilə TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><Yb> superqəfəslərin struktur parametrlərini, elektron quruluşunu və əmələ gəlmə entalpiyasını hesablamaqdır. Həmçinin radiotezlik diapazonda dəyişən elektrik sahələrində TlInS<sub>2</sub> monokristal nümunələrinin dielektrik əmsallarına və keçiriciliyinə iterbium (1 at.%) ilə dopinqin təsirinin 298 K temperaturunda öyrənilməsidir.

## 2. HESABLAMALARIN VƏ TƏCRÜBƏLƏRİN METODU

DFT hesablanması. Elektron halların zolaq strukturu və sıxlığı ATK kvant kimyəvi paketindən istifadə edərək sıxlıq funksional nəzəriyyəsi (DFT) əsasında hesablanmışdır [7]. Atomların ilkin elektron konfigurasiyalarının əsas vəziyyəti götürülmüşdür: Tl—[Xe]4f145d106s26p1, In—[Kr]4d105s25p1, S—3s23p4, Yb—[Xe]4f146s2. Birləşmənin atomlarının nüvəyə bağlı elektronları Vanderbilt psevdopotensiallarından istifadə edərək təsvir edilmişdir. Hesablamalarda müvafiq olaraq 32 atomdan ibarət TlInS<sub>2</sub> və Yb atomları ilə dopinq edilmiş TlInS<sub>2</sub><Yb> superqəfəslərindən istifadə etdilmişdir. Xassələrin DFT hesablamalarında sistemin ümumi enerjisinə mübadilə və korrelyasiya təsirləri Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) sxeminə uyğun olaraq lokal sıxlıq yaxınlaşması (LDA) və ümumiləşdirilmiş qradiyent yaxınlaşması (GGA) çərçivəsində nəzərə alınmışdır [9, 10]. TlInS<sub>2</sub><Yb> komponentlərinin atomlarının valent s-, p- və d-orbitallarını ehtiva edən əsas dəst üçün enerji dəyərlərinin dəyişməsinin hesablamaları aşağı enerjili nüvə yaxınlaşmasından istifadə etməklə aparılmışdır. Bu sxemdə atom nüvəsinin enerji halları iterasiya üsulu ilə hesablanır.

TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub>< Yb> superqəfəsləri relaksasiya edilmiş və həndəsəsi optimallaşdırılmışdır. TlInS<sub>2</sub><Yb> superqəfəslərin struktur optimallaşdırılmasından sonra ionların yerləri, elementar qəfəsin forması və həcmi əhəmiyyətsiz dərəcədə dəyişir. Bazis kinetik enerjisi ≤ 300 eV olan müstəvi dalğalardan istifadə etməklə qurulmuşdur. Öz-özünə uyğunlaşdırılmış sahənin hesablamalarında müstəvi dalğanın optimal kəsilmə enerjisi seçilmişdir. Elementar qəfəsin ümumi enerjisi  $5 \times 10^{-6}$  eV/atom dəqiqliklə hesablanmışdır. Atomlararası qüvvələr üçün yaxınlaşma həddi  $10^{-4}$  eV/Å götürülmüşdür. Əks qəfəsin k-nöqtələrinin seçimi Monkhorst-Pack metodundan istifadə etməklə həyata keçirilmişdir [7,11]. Brillouin zonasını bölmək üçün  $2 \times 2 \times 2$  k-nöqtələrindən istifadə edilmişdir. Elektron vəziyyətlərin hesablanması üçün kəmiyyətlərin bu seçimi TlInS<sub>2</sub> superqəfəslərin parametrlərinin hesablanmasında yüksək dəqiqliyi təmin edir.

Optimallaşdırılmış superqəfəslərin parametrlərindən istifadə edərək, sıfır temperaturda TlInS<sub>2</sub> əmələ gəlməsinin enerjisi (entalpiyası) [12] tənliyi ilə hesablanmışdır:

$$E_f = \left(\frac{1}{2}\right) [E_{\text{TlInS}_2}^{\text{total}} - (E_{\text{Tl}} + E_{\text{In}} + 2E_{\text{S}})] \quad (1)$$

burada  $E_{(TlInS_2)}$  cəmi  $TlInS_2$  düstur vahidi üzrə birləşmənin ümumi enerjisidir;  $E_{TI}$ ,  $E_{In}$  və  $E_S$  müvafiq olaraq  $TI$ ,  $In$  və  $S$  elementlərinin enerjiləridir (hər bir atom üçün).

*Nümunələrin hazırlanması.* Polikristalların sintezi.  $TlInS_2$  və  $TlInS_{2<1 at.\% Yb>}$  birləşməsinin sintezi üçün ilkin komponentlər kimi yüksək təmizliyemalilik kimyəvi elementlərdən  $TI$  ( $TI_{00}$ ),  $In$  ( $In_{00}$ ),  $S$  (yüksək təmizlik 16-5) və  $Yb$  (99,99%) istifadə edilmişdir. Polikristallar bir temperaturu sintez üsulu ilə sintez edilmişdir [13].  $TI$ ,  $In$ ,  $S$  və  $Yb$  ilkin komponentlərinin stexiometrik nisbətlərdə  $TlInS_2$  və  $TlInS_{2<1 at.\% Yb>}$  nümunələri üçün  $\sim 10$  q miqdarında götürülmüşdür. Nümunələr kvars ampulalarına yüklənmiş və ampulalar  $10^{-1}$  Pa qalıq təzyiqa qədər boşaldılmışdır.  $TlInS_2$  və  $TlInS_{2<1 at.\% Yb>}$  nisbətində çəkilmış komponentləri olan ampulalar elektrik sobasına qoyulmuş və nümunələr əridilmişdir. Əvvəlcə ampulalar 20-30 K/saat sürətlə 720 K-a qədər qızdırılır, bu halda 24 saat saxlanılır. Sonra temperatur 1100 K-ə qaldırılır və ampulalar 5 saat saxlanılır. Bu temperaturda,  $TlInS_2$  və  $TlInS_{2<1 at.\% Yb>}$  sintez olunur. Sonra ampulalar 10-20 K/saat sürətlə 670 K-a qədər soyudulmuş və sintez edilmiş polikristal nümunələr homogenləşdirilmiş şəkildə 120 saat tavllanmışdır. Nümunələr tavlandıqdan sonra ampulalar soyuq suda soyudulur.

$TlInS_2$  və  $TlInS_{2<1 at.\% Yb>}$  polikristallarının sintezinin tamamlanması, onların homogenliyi və fərdiliyi diferensial termik (DTA) və rentgen faza (XRD) analizi ilə müəyyən edilmişdir. DTA analizi STA 449 F3 Yupiter qurğusunda həyata keçirilib. Polikristalların toz halına salınmış nümunələrinin XRD analizi D8-ADVANCE difraktometrində  $0,5^\circ < 2\theta < 80^\circ$  (Cu Ka radiyasiyası;  $\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$ ) rejimində 40 kV və 40 mA-da aparılmışdır.

*Monokristalların böyüdülməsi.* Alınan  $TlInS_2$  və  $TlInS_{2<1 at.\% Yb>}$  polikristallarından onların monokristalları Bridgman-Stokbarger üsulu ilə yetişdirilmişdir [13]. 10 q ağırlığında sintez edilmiş  $TlInS_{2<1 at.\% Yb>}$  polikristal nümunəsi konusvari dibi olan 30 mm uzunluğunda və 9 mm diametrli kvars ampulasına yüklənmişdir. Nümunə ilə olan ampulanın havası  $10^{-3}$  Pa-a qədər boşaldılmış və ampulanın ağızı əridilib bağlanmışdır. Sonra  $TlInS_{2<1 at.\% Yb>}$  nümunəsi olan ampula monokristalların yetişdirilməsi üçün Bridgman qurğusunun boruşəkili şaquli iki zonalı ("isti" zona və "soyuq" zona) elektrik sobasına yerləşdirildi.

Sobanın "isti" və "soyuq" zonalarının temperaturu bir-birindən ayrıca olaraq tənzimləndi. Sobada temperaturun saxlanılmasının dəqiqliyi  $\pm 0,5$  K idi. Ampulada rristallaşma cəbhəsində temperatur qradienti 20 K/sm idi. Qaynar zonanın maksimal temperaturu 1050 K idi. Monokristalın böyümə sürəti 0,1 mm/saat idi. Sobanın isti zonasına qoyulmuş ampuladakı  $TlInS_{2<1 at.\% Yb>}$  nümunəsi əridilmiş və ərimə 1-2 saat ərzində 1050 K temperaturda saxlanılmışdır. 10 mm/gün və tək kristal yetişdirildi.

$TlInS_2$  və  $TlInS_{2<1 at.\% Yb>}$  nümunələrinin monokristalları yetişdirildikdən sonra, Bridgman sobasının hər iki temperatur zonası eyni vaxtda 10–20 K/saat sürəti ilə 670 K-a qədər soyudulur. Bu temperaturda  $TlInS_2$  və  $TlInS_{2<1 at.\% Yb>}$  kristallar homogenləşdirici tavalanmaya qoyulur. Tavllanmış monokristal nümunələri otaq temperaturuna qədər soyudulur.

Beləliklə, müvafiq olaraq TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb>-nin homogen tünd narıncı monokristalları əldə edilmişdir. Bu şəkildə yetişdirilən TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristalları fəza qrupu C2/c-C<sub>2h</sub><sup>6</sup> olan monoklinik sinqoniyaya malik idi.

*Dielektrik xassələri.* TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristal nümunələrinin dielektrik əmsalları V486 kummetrindən istifadə etməklə rezonans üsulu ilə ölçüldü [14]. Dəyişən elektrik sahəsinin tezlik diapazonu  $5 \times 10^4$ - $3.5 \times 10^7$  Hz götürülmüşdür. Elektrik ölçmələri üçün nümunələr monoklinik sistemli TlInS<sub>2</sub> kristalının kristalloqrafik c-oxuna perpendikulyar olan müstəvi kondansatorlar şəklində hazırlanmışdır. Plitə halı nümunələr üçün elektrodlar kimi gümüş pastadan istifadə edilmişdir. TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> plitə nümunələrinin qalınlığı 200 µm, plitələrin sahəsi isə  $4 \times 10^{-2}$  sm<sup>2</sup> idi. Dielektrik ölçmələr 298 K-də aparılmışdır.

Materialın elektrik sahəsi ilə qarşılıqlı təsirini təsvir edən materialların dielektrik xüsusiyyətləri məlum tənliklərlə müəyyən edilmişdir

$$\varepsilon = \varepsilon' - j\varepsilon'' \quad (2)$$

$$\varepsilon' = \varepsilon_r \varepsilon_0 \quad (3)$$

$$\varepsilon'' = \varepsilon' \operatorname{tg} \delta \quad (4)$$

burada  $\varepsilon^{\wedge}$  keçiriciliyin həqiqi hissəsidir,  $\varepsilon^{\wedge\prime\prime}$  dielektrik keçiriciliyin xəyali hissəsidir (dielektrik itkisi əmsalı),  $\varepsilon_r$  – nisbi keçiricilik,  $\varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$  F/m – elektrik sabiti,  $\delta$  – dielektrik itki bucağı.

TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristal nümunələrinin ölçülməsi zamanı qurğuda rezonans mövqeyinin təkrarlanması qabiliyyəti tutumda  $\pm 0,2$  pF və keyfiyyət əmsalı baxımından isə rezonator şkalasının  $\pm 1,0$ - $1,5$  bölmələri ( $Q = 1/\operatorname{tg} \delta$ ) olmuşdur. Bu halda, orta dəyərlərdən ən böyük sapmalar  $\varepsilon^{\wedge}$  üçün 3-4% və  $\operatorname{tg} \delta$  üçün 7% olmuşdur [14].

### 3. NƏTİCƏLƏR VƏ MÜZAKİRƏ

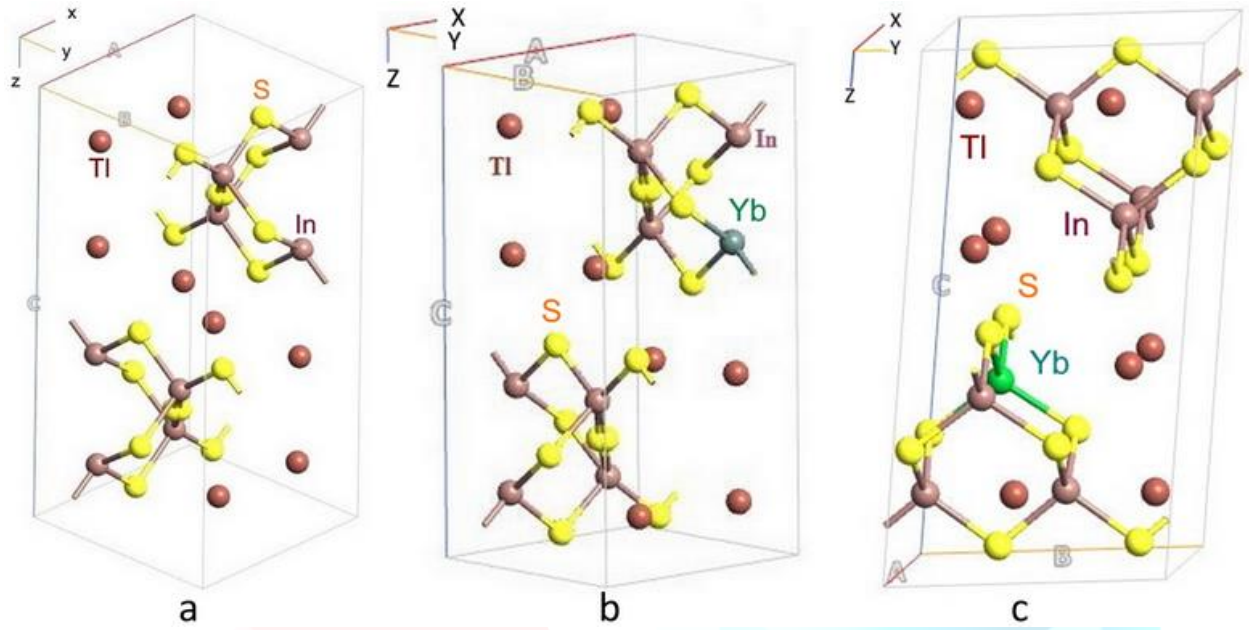
*Kristal qəfəs parametrləri.* Kimyəvi birləşmələrin dopinq edilməsi prosesində fiziki xassələr, xüsusən də birləşmənin kristal quruluşunun həcmində dopinq atomunun mövqeyindən asılıdır. TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub>< Yb> superqəfəslər elə qurulmuşdur ki, TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub>< Yb> komponentlərinin atomları monoklinik qəfəsdə verilmiş mövqə tuturdu. Dopinq elementin (Yb) TlInS<sub>2</sub> atomlarının TlInS<sub>2</sub>-nin ideal kristal qəfəsinin yerlərinə nisbətən yerdəyişməsinə təsiri orta kvadrat yerdəyişməsi ilə qiymətləndirilir:

$$MSAD = 1/N \sum_i (R_i - R_i^{\text{ideal}})^2 \quad (5)$$

burada MSAD atomların ortakvadratik yerdəyişməsidir,  $i$  bütün atom mövqələrinin indeksləridir  $R_i$   $N$  atomlar üçün,  $R_i^{\text{ideal}}$  qəfəs sahələrinin koordinatlarıdır.

TlInS<sub>2</sub>-də indiumun dopinq iterbium (Yb) ilə qismən əvəz edilməsi TlInS<sub>2</sub> kristalının superqəfəslərdəki atomların düzülməsini dəyişmir və kristal qəfəsin yerli deformasiyalarının dərəcəsi əhəmiyyətsizdir (<1%) (Şəkil 1a,b, c).





**Şəkil 1.** Monoklin sistemli TlInS<sub>2</sub> (a) və TlInS<sub>2</sub><Yb> (b,c) kristallarının vahid superqəfəslərinin atom quruluşu (fəza gr. C<sub>2/c</sub>-C<sub>2h</sub><sup>6</sup>).

Yuxarıda göstərilənlər TlInS<sub>2</sub> (Tl<sup>+</sup> In<sup>(3+)</sup> S<sub>2</sub><sup>(2-)</sup>) strukturuna uyğundur, burada hər In<sup>(3+)</sup> kation dörd ən yaxın S<sub>2</sub><sup>(2-)</sup> anionları ilə dörd kovalent əlaqə əmələ gətirir. Bu halda doping Yb<sup>3+</sup> (0,86 Å) ion radiusu Tl<sup>+</sup> (1,50 Å) ion radiusundan In<sup>3+</sup> (0,80 Å) ion radiusuna daha yaxındır.

TlInS<sub>2</sub> strukturunun həndəsəsi optimallaşdırılmışdır ki, bütün sistemdən atomlara təsir edən qüvvələr 0,1 eV/Å-dan çox olmasın. TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><Yb>-in optimallaşdırılmış qəfəs parametrlərinin DFT hesablamasının nəticələri Cədvəl 1-də verilmişdir.

**Cədvəl 1.** Monoklinik sistemli TlInS<sub>2</sub> kristalının 2 × 2 × 2 superqəfəslərinin qəfəs parametrlərinin DFT ilə hesablanmış və eksperimental qiymətləri (fəza gr. C<sub>2/c</sub>-C<sub>2h</sub><sup>6</sup>)

Qəfəs parametrləri	DFT hesablama		Təcrübə	
	LDA	GGA-PBE	[5]	[15]
<i>a</i> , Å	10.902	10.952	10.95	10.90
<i>b</i> , Å	10.945	10.957	10.95	10.94
<i>c</i> , Å	15.181	15.177	15.14	15.18
β°	96.883	96.883	100	100.21
Z	16	16	16	16

DFT hesablamalarında, spin-orbit qarşılıqlı təsirin mübadilə-korrelyasiya enerjisinə (GGA-PBE) töhfəsini nəzərə aldıqda, xassələrin hesablanmış və eksperimental dəyərləri arasındakı fərq azalır.

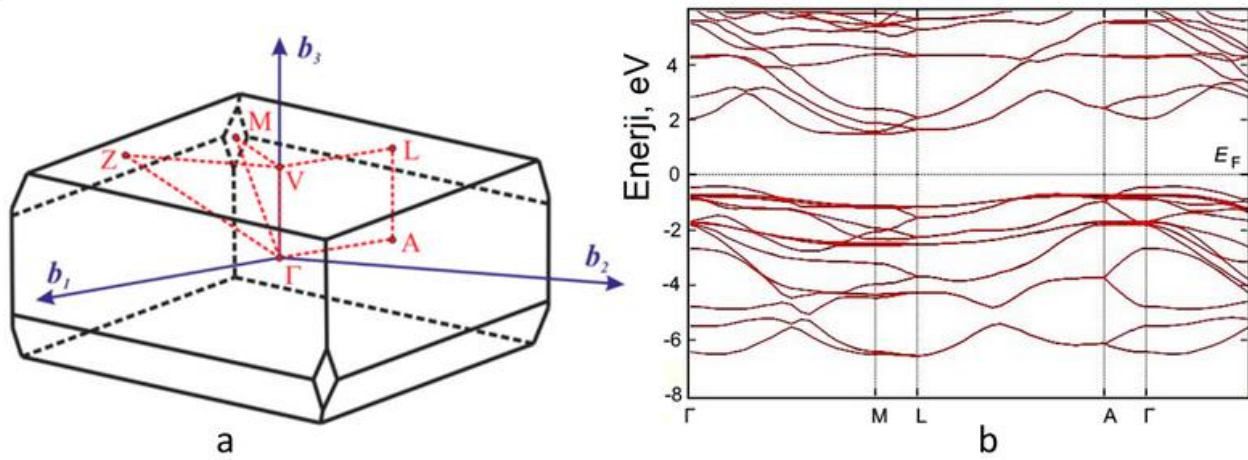
*Əmələgəlmə entalpiyası.* TlInS<sub>2</sub>-nin əmələ gəlmə enerjisi 298.15 K-də TI (altıbucaqlı kristal sistemi, fəza qrupu P6<sub>3</sub>/mmc (No. 194)), In (tetraqonal sinqoniya, fəza qrupu I4/mmm (No. 139)) və S (ortoromb sinqoniya, fəza qrupu Fdddz (No. 70)) elementlərinin standart vəziyyətlərindən istifadə etməklə hesablanmışdır. DFT GGA-PBE ilə T = 0 K-də hesablanmış əmələgəlmə entalpiyası ( $E_f \approx H^0$ ) monoklinik sistemli (fəza qrupu C2/c) TlInS<sub>2</sub> birləşməsinin) Cədvəldə 2-də verilmişdir.

Cədvəl 2. DFT GGA-PBE TlInS<sub>2</sub> (fəza qrupu C2/c-C<sub>2h</sub><sup>6</sup>) birləşməsinin əmələ gəlməsinin hesablanmış entalpiyası (formula vahidinə görə)

Birləşmə	$-H^0$ , kC/mol	
	DFT GGA-PBE	GGA / GGA+U / R2SCAN
TlInS <sub>2</sub> (C2/c)	237.15	297.56 [16]

TlInS<sub>2</sub> (fəza qrupu C2/c-C<sub>2h</sub><sup>6</sup>) birləşməsinin entalpiyasının H<sup>0</sup> müxtəlif funksionaların iştirakı ilə hesablanmış məlumatlarının müqayisəsi göstərir (Cədvəl 2) entalpiya qiymətlərinin fərqi təxmini 20%-diq. Göründüyü kimi, DFT GGA-PBE ilə bizim tərəfimizdən hesablanmış TlInS<sub>2</sub> (C2/c) əmələ gəlməsinin entalpiyası -237,15 kJ/mol-dur və TlInS<sub>2</sub> entalpiyasının hesablanmış GGA+U [16] qiymətinə yaxındır. TlInS<sub>2</sub> birləşməsinin entalpiyasının H<sup>0</sup> dəyərlərindəki səpilmə müxtəlif funksionallar ilə qiymətləndirmə üsullarının istifadəsi ilə əlaqələndirilə bilər.

*Zona quruluşu.* TlInS<sub>2</sub> superqəfəslərinin zolaq strukturunda valentlik zolağının minimumu və keçiricilik zolağının maksimumu Brilluen zonasının  $\Gamma$  nöqtəsində yerləşir (şəkil 2a,b). Buna görə də, TlInS<sub>2</sub> birbaşa enerji diapazonuna malikdir (E<sub>g</sub>). Başqa sözlə TlInS<sub>2</sub> birləşməsi birbaşa zolaq boşluğu olan p tipli yarımkəçiricidir.



**Şəkil 2.** Birinci Brillouin zonası (a) və  $2 \times 2 \times 2$  superqəfəslərinin DFT GGA-PBE ilə hesablanmış monoklinik sistemli TIInS<sub>2</sub> (C2/c-C<sub>2h</sub><sup>6</sup>) kristalının zolaq strukturu (b).

TIInS<sub>2</sub> və TIInS<sub>2</sub><Yb> kristallarının spin-orbit təsiri və van der Waals qarşılıqlı təsirinin nəzərə alınmadan qadağan olunmuş zolağın ( $E_g$ ) DFT hesablanması nəticələri Cədvəl 3-də verilmişdir.

**Cədvəl 3.** TIInS<sub>2</sub> və TIInS<sub>2</sub>< Yb> kristallarının  $2 \times 2 \times 2$  superqəfəsləri üçün DFT ilə hesablanmış və eksperimental tapılmış zolaq boşluqları (fəza qrupu C2/c-C<sub>2h</sub><sup>6</sup>)

Tərkib	DFT hesablanması		Təcrübə
	$E_g$ , eV		
	LDA	GGA-PBE	77 K
TIInS <sub>2</sub>	1.2	1.82	2.58
TIInS <sub>2</sub> < Yb >	1.1	1.41	2.53

Cədvəl 3-dən görüldüyü kimi TIInS<sub>2</sub>-nin bant boşluğunun DFT hesablanmış qiyməti eksperimental dəyərlərdən kiçikdir TIInS<sub>2</sub> üçün  $E_g$ -nin DFT GGA PBE hesablanmış dəyəri  $E_g = 1.82$  eV-dir ki, bu da bizim təcrübi optik nəticədən, yəni  $E_g = 2.58$ -dən azdır.



DFT hesablamasında  $E_g$  kəmiyyəti aşağı doldurulmamış və yuxarı doldurulmuş vəziyyətlərin enerjiləri fərqi bərabər olduğu qəbul edilir (HOMO-LUMO boşluğu).

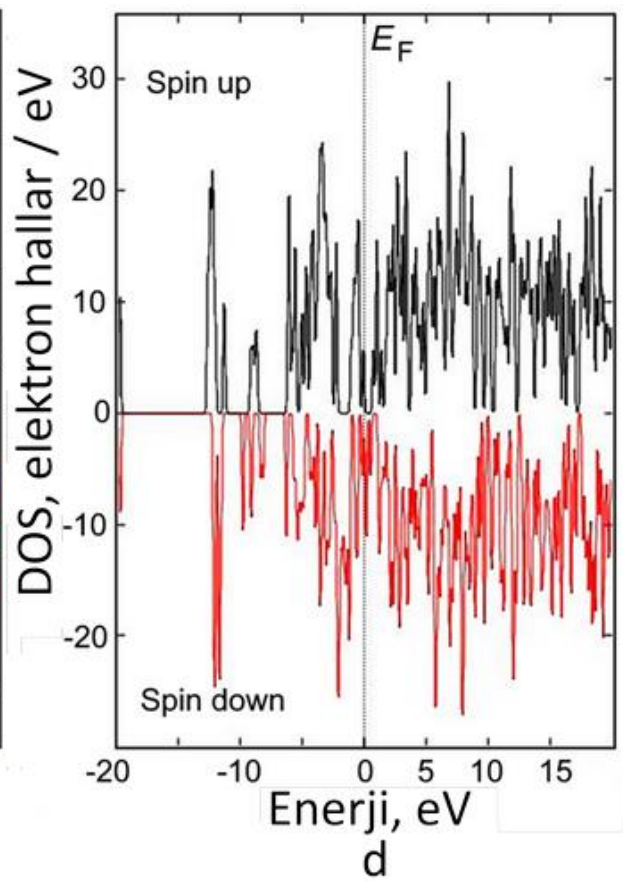
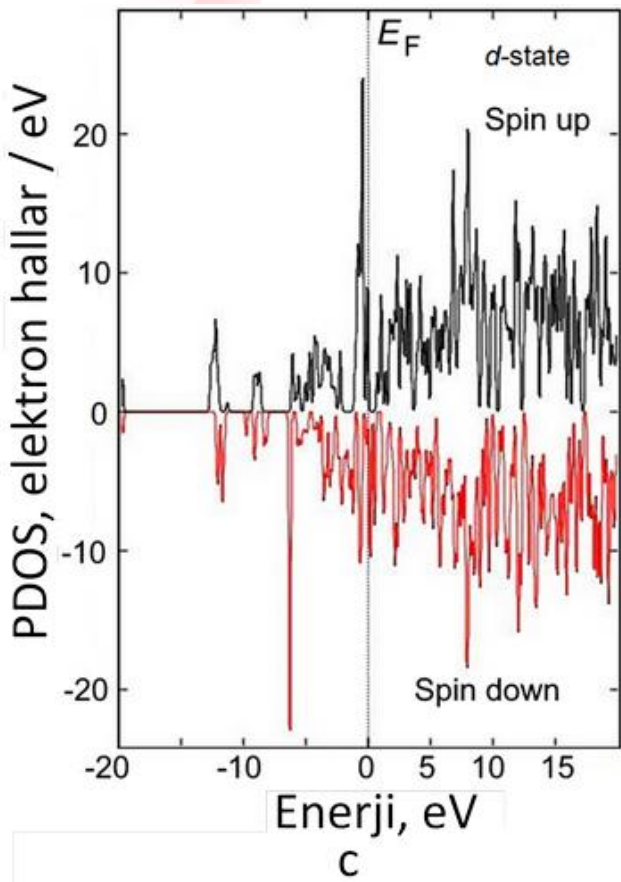
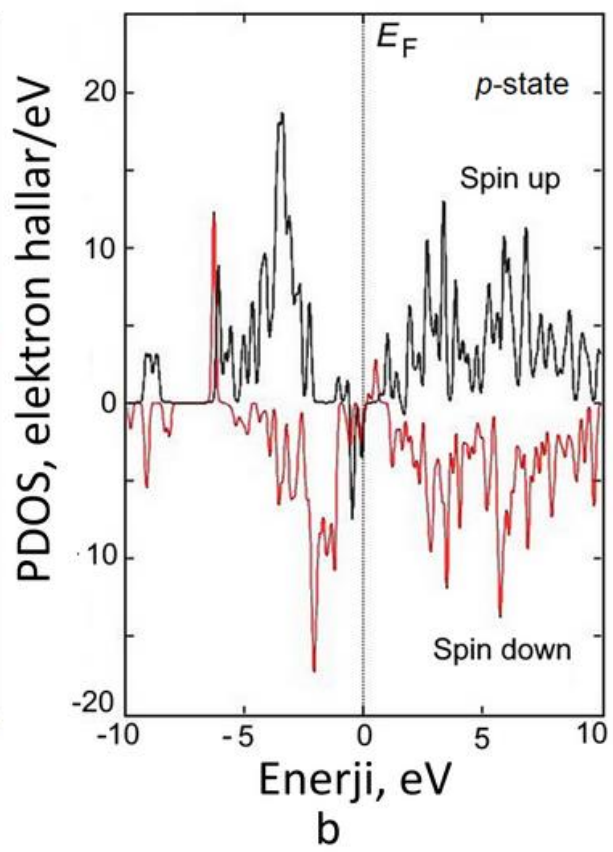
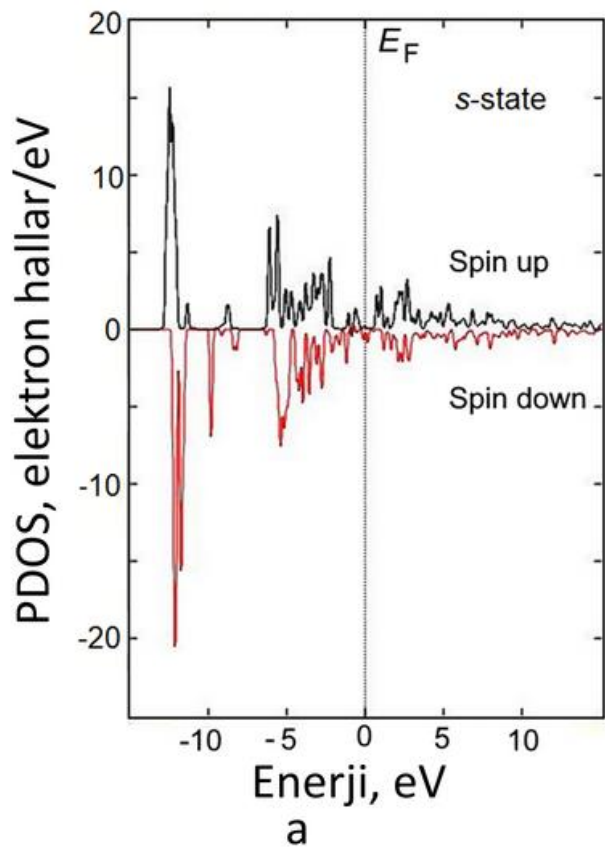
Bu, ionlaşma enerjiləri və elektron hərisliyi arasındakı fərq kimi, optik boşluğun eninin eksperimental qiymətindən fərqlənir.

$E_g$  kəmiyyətindəki belə bir fərq, məsələn, dəyişmə-korrelyasiya qarşılıqlı təsirinə düzəliş şəklində optik yarığın eninə töhfəsi ilə nəzərə alın bilər [17]:  $E_g = \epsilon_g + \Delta_{XC}$ , burada  $E_g$  optik boşluğun eni,  $\epsilon_g$  HOMO-LUMO boşluğu,  $\Delta_{XC}$  mübadilə-korrelyasiya düzəlişidir.

TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub>< Yb> superqəfəslərinin zolaq strukturunun müqayisəli təhlilindən aşağıdakıları demək olar. TlInS<sub>2</sub> kristal qəfəsindəki In atomu, dopinq Yb atomu ilə əvəz edildikdə, səviyyələrin enerji boşluğu azalır. Bu, keçiricilik zolağının Fermi enerjisinə ( $E_F$ ) doğru yerdəyişməsinə gətirib çıxarır (şək. 2b).

Beləliklə  $E_g$  TlInS<sub>2</sub> ilə müqayisədə TlInS<sub>2</sub><Yb> zolaq boşluğunun azalması TlInS<sub>2</sub> (Tl<sup>+</sup> In<sup>(3+</sup>) S<sub>2</sub><sup>(2-)</sup>) kristalda dopinq Yb<sup>3+</sup> (0,86 Å) ilə In<sup>3+</sup> (0,80 Å) əvəzetmə nəticəsində kimyəvi əlaqənin zəifləməsi ilə əlaqədardır.  $E_g$ -də belə bir azalma, ehtimal ki, dopinq iterbiumunun enerji səviyyələri ilə TlInS<sub>2</sub> aktiv mərkəzlərinin qismən kompensasiyası ilə əlaqədardır. Bu halda TlInS<sub>2</sub>< Yb> kristalında xüsusi defektlərin yaranması və miqراسiyasında mümkündür.

Elektron halların sıxlığı (DOS). TlInS<sub>2</sub>-də elektron halların qismən (parsial) sıxlığının (PDOS) və DOS DFT hesablamalarının nəticələri Şekil 3a,b,c,d göstərilib.

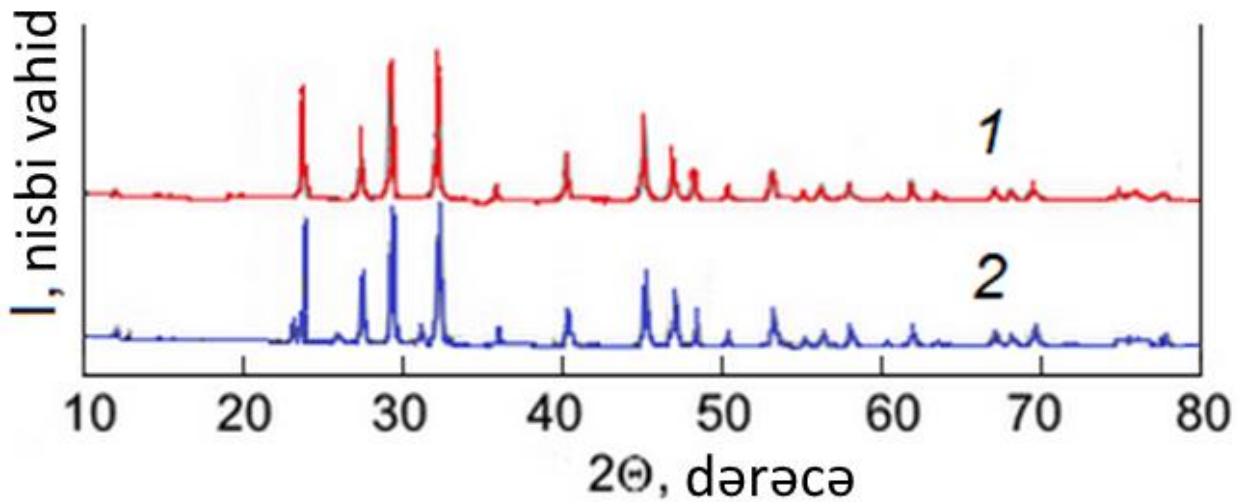


**Şəkil 3.** DFT GGA PBE üsulla TlInS<sub>2</sub> əsasında 2×2×2 superqəfəslərinin PDOS (a – s-halı, b – p-halı, c – d-halı) və ümumi DOS (d) hallarının qismən sıxlığı. Fermi səviyyəsi sıfır eV olaraq təyin edilmişdir.

Şəkilə PDOS, spin-orbit əlaqəsinin təsirini nəzərə almadan hər bir atom orbitalının fərdi töhfələrini göstərir. TlInS<sub>2</sub> atomlarının elektron s-, p- və d-səviyyələrinin sıxlıqlarının təhlilindən belə nəticə çıxır ki, valentlik zolağının maksimumunda S (3p<sub>4</sub>) və Tl (6p<sub>1</sub>) atomlarının p-halları üstünlük təşkil edir. Halbuki keçiricilik zolağının minimumunda In (5s<sub>2</sub>) və S (3p<sub>4</sub>) atomlarının s və p halları və Tl (6p<sub>1</sub>) və In (5p<sub>1</sub>) atomlarının p vəziyyətindən kiçik töhfələr üstünlük təşkil edir. Tl atomlarının 6p<sub>1</sub> halları Fermi enerjisindən (E<sub>F</sub>) aşağıda 6s<sub>2</sub> Tl vəziyyəti ilə hibridləşir. Eyni zamanda, Tl-nin s- və p-halları E<sub>F</sub>-dən aşağıda və yuxarıda In atomlarının (5p<sub>1</sub>) p-halı ilə hibridləşir.

Yuxarıda göstərilən hallara əlavə olaraq, TlInS<sub>2</sub>< Yb>-nin PDOS spektrlərinə Yb atomlarının (4f<sub>14</sub>) və (6s<sub>2</sub>) f<sub>14</sub> və s<sub>2</sub> vəziyyətlərindən elektron halların sıxlığına çox kiçik töhfələr də daxildir.

*Dielektrik xassələri.* Dielektrik xüsusiyyətlərini ölçmək üçün yuxarıdakı üsula uyğun olaraq bizim tərəfimizdən yetişdirilmiş TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristal nümunələrindən istifadə edilmişdir. XRD analizi yetişdirilmiş nümunələrin monoklinik quruluşa malik olduğunu göstərdi (şək. 4).

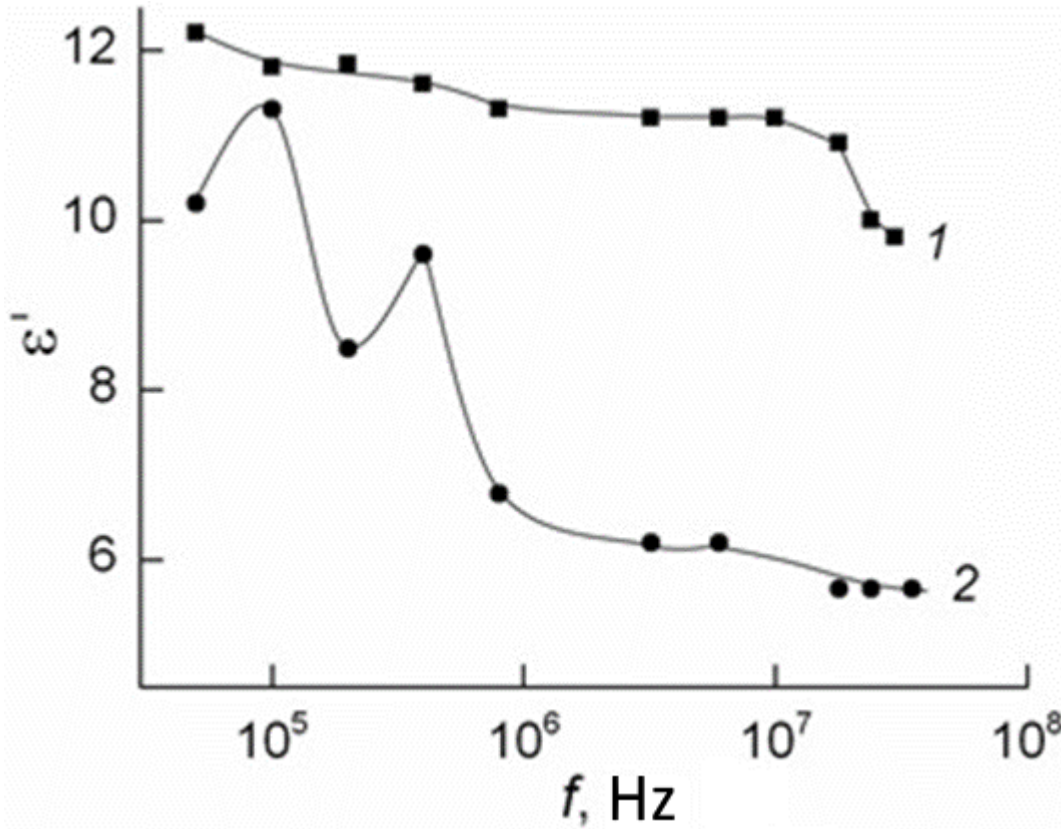


**Şəkil 4.** TlInS<sub>2</sub> (1) və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> (2) kristallarının toz nümunələrinin rentgenoqramları.

TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristal nümunələrinin dielektrik xassələrinin və elektrik keçiriciliyinin dəyişən cərəyanda ölçülən nəticələrini aşağıda nəzərdən keçiririk.

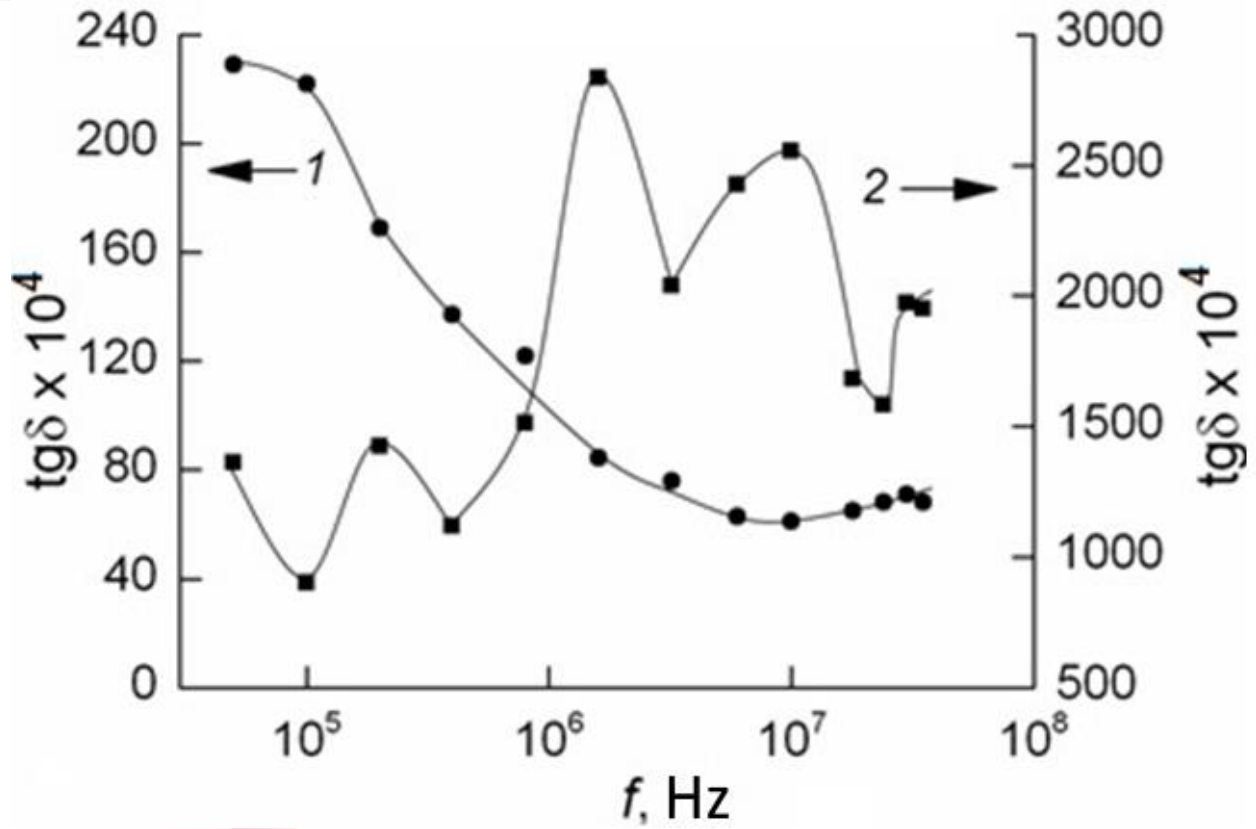
Şəkil 5-də TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> nümunələrinin keçiriciliyinin ( $\epsilon^A$ ) tezlik asılılıqları göstərilir.

Şəkil 5-dən görünür ki, TlInS<sub>2</sub>-də (əyri 1) bütün tədqiq olunan tezlik diapazonunda  $\epsilon^{\wedge}$  qiymətinin əhəmiyyətli dispersiyası müşahidə olunmur və onun qiyməti 9,8–12,2 arasında dəyişir. TlInS<sub>2</sub> kristalının iterbium aşqarlanması nəzərə çarpan dielektrik dispersiyaya gətirib çıxarır (Şəkil 5, əyri 2). Beləliklə, TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> nümunəsində tezliyin  $5 \times 10^4$ -dən  $3.5 \times 10^7$  Hz-ə qədər dəyişməsi ilə  $\epsilon^{\wedge}$  dəyəri 11.3-dən 5.65-ə qədər azalır, yəni iki dəfə azalır.



**Şəkil 5.** 298 K-da TlInS<sub>2</sub> (əyri 1) və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> (əyri 2) monokristallarının nümunələri üçün  $\epsilon^{\wedge}(f)$  dispersiya əyriləri.

TlInS<sub>2</sub> <1 at.% Yb> monokristal nümunəsindəki dielektrik itki tangensinin ( $\text{tg}\delta$ ) qiymətləri TlInS<sub>2</sub>-də  $\text{tg}\delta$  qiymətlərini əhəmiyyətli dərəcədə üstələyirdi (Şəkil 6).

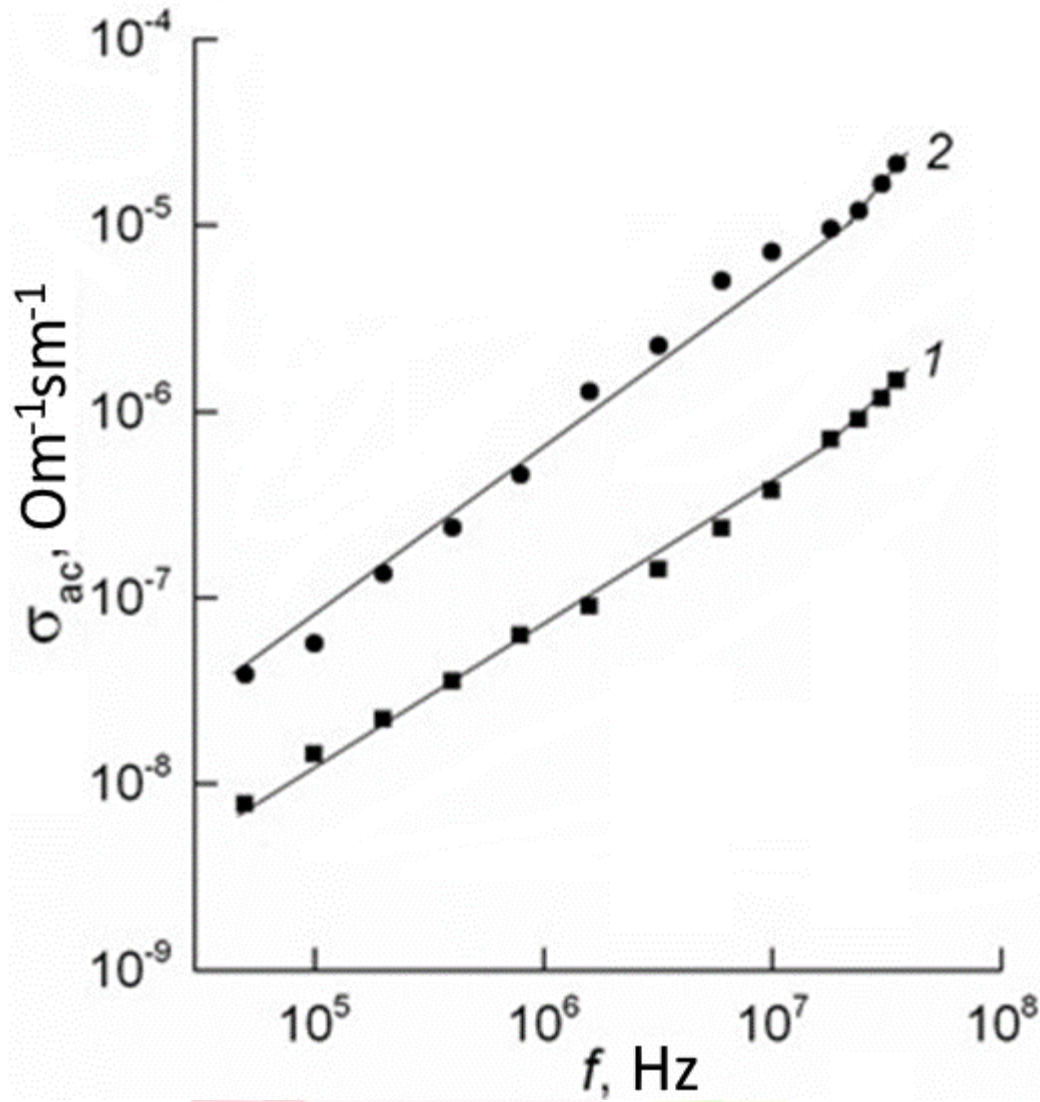


**Şəkil 6.** 298 K-də TlInS<sub>2</sub> (əyri 1) və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> (əyri 2) monokristallarının nümunələrində dielektrik itkisi tangensinin tezlikdən asılılığı.

TlInS<sub>2</sub> nümunəsində  $tg\delta(f)$  əyrisi keçiriciliyin itirilməsini göstərən monoton şəkildə azalan xarakterə malik idi. TlInS<sub>2</sub>-dən fərqli olaraq, TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb>-də  $tg\delta(f)$  asılılığı relaksasiya itkilərini göstərən maksimumların olması ilə xarakterizə olunurdu. İtterbiyumun TlInS<sub>2</sub> kristallarına daxil edilməsi həm də keçiriciliyin  $\epsilon''(f)$  xəyali hissəsinin dispersiya əyriələrinin modifikasiyasına gətirib çıxardı.

Şəkil 7-də 298 K-da TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristallarının tezlikdən asılı keçiriciliyinin öyrənilməsinin eksperimental nəticələri göstərilir.  $5 \times 10^4 - 10^7$  Hz tezlik diapazonunda TlInS<sub>2</sub> monokristalının dəyişən cərəyan keçiriciliyi  $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$  qanununa uyğun olaraq dəyişir və  $f \sim 10^7$  Hz-də  $\sigma_{ac}(f)$  asılılığı superxətti olur.





**Şəkil 7.** TlInS<sub>2</sub> (əyri 1) və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> (əyri 2) monokristallarının T = 298 K-də tezlikdən asılı keçiriciliyi.

TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> nümunəsinin  $\sigma_{ac}(f)$  dispersiya əyrisi də qrafikdə iki yamaclı idi:  $f = 5 \times 10^4 - 2.4 \times 10^7$  Hz-də  $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$  və  $f > 2.4 \times 10^7$  Hz-də  $\sigma_{ac} \sim f^2$ . Yarımkəçiricilərdə zona tipli AC keçiriciliyi əsasən  $10^{10} - 10^{11}$  Hz-ə qədər tezlikdə müstəqildir. TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> nümunələrində müşahidə etdiyimiz  $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$  eksperimental asılılığı göstərir ki,  $\sigma_{ac}$  keçiriciliyi zolaq boşluğunda lokallaşdırılmış vəziyyətlər arasında yük daşıyıcısının hoppanması ilə bağlıdır. Bunlar icazə verilən zolaqların kənarlarına yaxın lokallaşdırılmış vəziyyətlər və ya Fermi səviyyəsinin yaxınlığında lokallaşdırılmış vəziyyətlər ola bilər [18].

Lakin eksperimental şəraitdə Fermi səviyyəsinə yaxın vəziyyətlər üzərində keçiricilik həmişə icazə verilən zolaqların kənarlarına yaxın vəziyyətlər üzərində keçiricilik üzərində üstünlük təşkil etdiyinə görə, TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1%. Yb> nümunələrində əldə etdiyimiz  $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$  qanunu Fermi

səviyyəsinin yaxınlığında lokallaşdırılmış dövlətlər üzərində yük transferinin hoppanma mexanizmini göstərir [19]:

$$\sigma_{ac}(f) = \frac{\pi^3}{96} e^2 k T N_F^2 a^5 f \left[ \ln \left( \frac{v_{ph}}{f} \right) \right]^4 \quad (6)$$

burada  $e$  elektron yüküdür;  $k$  - Boltsman sabitidir;  $N_F$  Fermi səviyyəsinə yaxın vəziyyətlərin sıxlığıdır;  $a = 1/\alpha$  – lokalizasiya radiusu;  $\alpha$  lokallaşdırılmış yük daşıyıcısının dalğa funksiyasının tənəzzül sabitidir  $\psi \sim e^{-\alpha r}$ ;  $v_{ph}$  fonon tezliyidir.

Formula (6)-ya əsasən, keçiricilik tezlikdən asılıdır, yəni.  $f \ll v_{ph}$ -da  $\sigma_{ac}$  dəyəri  $f$  0.8-ə mütənasibdir. Formula (6)-dan istifadə edərək, Fermi səviyyəsində vəziyyətlərin sıxlığını  $\sigma_{ac}(f)$  təcrübi olaraq tapılan qiymətlərdən hesabladıq. TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristal üçün hesablanmış  $N_F$  qiyməti  $N_F = 1,5 \times 10^{19} \text{ eV}^{-1} \text{ sm}^{-3}$  olmuşdur. TlInS<sub>2</sub> nümunəsində  $N_F$  dəyəri  $5,2 \times 10^{18} \text{ eV}^{-1} \text{ sm}^{-3}$  idi. Bunlar. TlInS<sub>2</sub> monokristalının iterbium ilə dopinqi Fermi səviyyəsinə yaxın halların sıxlığının təxminən üç dəfə artmasına səbəb oldu.

$N_F$  hesablanarkən lokalizasiya radiusu üçün  $a = 14 \text{ \AA}$  qiyməti götürülüb. TlInS<sub>2</sub> üçün  $v_{ph}$  qiyməti isə  $10^{12} \text{ Hz}$  [7] götürülmüşdür.

Dəyişən cərəyanda hoppanma keçiriciliyi nəzəriyyəsinə görə orta hoppanma məsafəsi ( $R$ ) aşağıdakı düsturla müəyyən edilir [18]:

$$R = \frac{1}{2\alpha} \ln \left( \frac{v_{ph}}{f} \right). \quad (7)$$

(7) düsturunda  $f$ -in qiyməti  $f$  0.8-qanunu müşahidə olunduğu orta tezliyə uyğun gəlir. TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristal üçün düstur (7) ilə hesablanmış  $R$  qiyməti  $80 \text{ \AA}$  idi. TlInS<sub>2</sub> nümunəsində hoppanma məsafəsinin  $R = 86 \text{ \AA}$  olduğu müəyyən edildi.

$R$  bu qiymətləri TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristallarında yük daşıyıcısının lokalizasiya mərkəzləri arasındakı orta məsafədən təxminən 6 dəfə yüksəkdir.

$R$  qiymətləri imkan verir ki, aşağıdakı düsturla TlInS<sub>2</sub> < 1 at.% Yb > monokristalda orta hoppanma vaxtını təyin edək

$$\tau^{-1} = v_{ph} \cdot \exp(-2\alpha R) \quad (8)$$

Beləliklə  $\tau = 8.3 \times 10^{-8} \text{ s}$  alınır. TlInS<sub>2</sub> nümunəsində  $\tau = 2 \times 10^{-7} \text{ s}$  olduğu aşkar edilmişdir.

Aşağıdakı formuluna görə [18]:

$$\Delta E = \frac{3}{2\pi R^3 \cdot N_F} \quad (9)$$

TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb>-də Fermi səviyyəsinə yaxın lokallaşdırılmış halların enerji yayılması təxmin edilmişdir:  $\Delta E = 6 \times 10^{-2}$  eV.

Və nəhayət (10) formulaya görə:

$$N_t = N_F \cdot \Delta E \quad (10)$$

AC keçiriciliyinə cavabdeh olan TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb>-də dərin tələlərin konsentrasiyası müəyyən edilmişdir:  $N_t = 9 \times 10^{17} \text{ sm}^{-3}$  (TlInS<sub>2</sub>-də  $N_t = 7.3 \times 10^{17} \text{ sm}^{-3}$ ).

Əldə edilən nəticələr göstərdi ki, TlInS<sub>2</sub> monokristalının iterbium (1 at.% Yb) ilə dopinq edilməsi Fermi səviyyəsinə yaxın vəziyyətlərin sıxlığının artmasına və orta hoptanma uzunluğunun və vaxtının azalmasına səbəb olub.

## NƏTİCƏLƏR

Sintez olunmuş TlInS<sub>2</sub> birləşməsinin monoklinik quruluşu (fəza qrupu C2/c-C<sub>2h</sub><sup>6</sup>) qəfəs parametrlərinin DFT hesablamalarının və rentgen faza analizinin təhlilinin nəticələri bir-biri ilə yaxşı uyğunlaşır. DFT GGA PBE üsulu ilə tərəfimizdən qiymətləndirilən TlInS<sub>2</sub> (C2/c) əmələ gəlmə entalpiyası  $H^0 = -237.15 \text{ kJ/mol}$  idi və TlInS<sub>2</sub> birləşməsinin məlum nəzəri qiymətləri  $H^0$  daxilindədir. TlInS<sub>2</sub> formalaşmasının hesablanmış entalpiyasının müqayisəsi məlum  $H^0$  hesablanmış qiymətlərdən ~20% fərqləndiyini göstərir.

DFT GGA PBE hesablamalarına görə, TlInS<sub>2</sub> kristalı birbaşa zona boşluğu olan p tipli yarımkəçiricidir.

Spin-orbit əlaqəsinin və van der Waals qarşılıqlı təsirini nəzərə almadan,  $2 \times 2 \times 2$  TlInS<sub>2</sub> superqəfəsləri üçün hesabladığımız zona boşluğu (bant gap)  $E_g = 1.82 \text{ eV}$ -dir. Bu, TlInS<sub>2</sub> üçün eksperimental optik  $E_g = 2.58 \text{ eV}$  məlumatdan azdır.

İtterbiumun olması TlInS<sub>2</sub> kristalının superqəfəslərinin DOS spektrinə əhəmiyyətli dərəcədə təsir göstərmir. Bu onu göstərir ki, Yb dopinqi TlInS<sub>2</sub>-nin elektron strukturunu güclü şəkildə təhrif etmir, bu, Yb<sup>3+</sup> (0,86 Å) və əvəz edilmiş In<sup>3+</sup> (0,80 Å) ion radiusunun yaxınlığı və onların ionlaşma potensiallarının fərqlənməsi ilə əlaqələndirilir. Lakin Yb-nin tətbiqi DFT GGA PBE hesablamalarında TlInS<sub>2</sub> kristalının optik boşluğunun azalmasına gətirib çıxarır ki, bu da mübadilə-korrelasiya funksionalının təsirləri ilə bağlıdır.

TlInS<sub>2</sub> və TlInS<sub>2</sub><1 at.% Yb> monokristallarının dielektrik əmsallarının tezlik dispersiyasının tədqiqi üzrə eksperimental nəticələri nəzərə alaraq dielektrik itkilərinin xarakteri (keçiricilik və relaksasiya itkiləri) və yük ötürmə mexanizmi (hoptana ötürmə mexanizmi) müəyyən edilmişdir.  $f = 5 \times 10^4 - 2.4 \times$

$10^7$  Hz tezlik diapazonunda  $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$  monokristalın dəyişən cərəyan keçiriciliyi  $\sigma_{ac} \sim f^{0.8}$  qanunauyğunluğuna tabe olur. Bu, Fermi səviyyəsinə yaxın lokallaşdırılmış hallar vasitəsilə yarımkeçiricilərdə yüklərin ötürülməsinin hoptanma mexanizmi üçün xarakterikdir.

Hoptanma keçiriciliyi nəzəriyyəsi çərçivəsində aşağıdakı kəmiyyətlər hesablanmışdır: a) Fermi səviyyəsinə yaxın vəziyyətlərin sıxlığı:  $5.2 \times 10^{18} \text{ əB}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$  для  $\text{TlInS}_2$  и  $1.5 \times 10^{19} \text{ əB}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$  для  $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ ; b) halların enerji yayılması (0.14 eV  $\text{TlInS}_2$  üçün  $6 \times 10^{-2}$  eV  $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$  üçün); c) hoptanmaların orta vaxtı ( $2 \times 10^{-7}$  s  $\text{TlInS}_2$  üçün və  $8.3 \times 10^{-8}$  s  $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$  üçün); d) hoptanma məsafəsi (86 Å  $\text{TlInS}_2$  üçün və 80 Å  $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$  üçün); e) AC keçiriciliyinə cavabdeh olan dərin tələlərin konsentrasiyası ( $7.3 \times 10^{17} \text{ sm}^{-3}$   $\text{TlInS}_2$  üçün və  $9 \times 10^{17} \text{ sm}^{-3}$   $\text{TlInS}_2 < 1 \text{ at. \% Yb} >$ ).

Beləliklə,  $\text{TlInS}_2$  monokristalının iterbium (1 at.% Yb) ilə dopinq edilməsi onun dielektrik xassələrini idarə etməyə imkan verir.

## BİBLİOQRAFIYA

1. *Mustafaeva S.N., Asadov M.M., Ismailov A.A.* // Phys. Solid State. 2009. V. 51. No 11. P. 2269. <https://doi.org/10.1134/S1063783409110122>
2. *Allakhverdiev K.R., Akhmed-zade N.D., Mamedov T.G.* // Low Temp. Phys. 2000. V. 26. No 1. P. 56. <https://doi.org/10.1063/1.593863>
3. *Allakhverdiev K.R., Mammadov T.G., Suleymanov R.A.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2003. V. 15. P. 1291. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/15/8/313>
4. *Qasrawi A.F., Gasanly N.M.* // J. Mater. Sci. 2006. V. 41. P. 3569. <https://doi.org/10.1007/s10853-005-5618-0>
5. *Henkel W., Hochheimer H.D., Carlone C.* // Phys. Rev. B. 1982. V. 26. P. 3211. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.26.3211>
6. *Hahn H., Wellman B.* // Naturwis. 1967. V. 54. No 2. P. 42. <https://doi.org/10.1007/bf00680166>
7. *Mustafayeva S.N., Asadov M.M., Huseynova S.S., Lukichev V.F.* // Phys. Solid State 2022. V. 64. № 6. C. 628. <https://doi.org/10.21883/FTT.2022.06.52388.299>
8. *Shklovskii B.I., Efros A.L.* Electronic Properties of Doped Semiconductors. Springer, Berlin, Heidelberg. 1984. 393 p. ISBN: 978-3-662-02403-4
9. *Asadov M.M., Mustafaeva S.N., Guseinova S.S.* // Phys. Solid State. 2021. V. 63. No 5. P. 797. <https://doi.org/10.1134/S1063783421050036>
10. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. No 18. P. 3865. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.3865>
11. *Monkhorst H.J., Pack J.D.* // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. No 12. P. 5188. <https://doi.org/10.1103/physrevb.13.5188>

	<p>12. <i>Asadov M.M., Mustafayeva S.N., Huseynova S.S., Lukichev V.F. // Microelectronics. 2023. T. 52, № 1. C. 46. <a href="https://doi.org/10.31857/S0544126922700181">https://doi.org/10.31857/S0544126922700181</a>, EDN: CXXQYI</i></p> <p>13. <i>Mustafaeva S.N., Asadov M.M., Gasanov N.Z. // Inorg. Mater. 2013. V. 49. No 12. P. 1175. <a href="https://doi.org/10.1134/S0020168518070099">https://doi.org/10.1134/S0020168518070099</a></i></p> <p>14. <i>Mustafaeva S.N., Asadov M.M., Guseinova S.S. et al. // Phys. Solid State. 2022. V. 64. No 4. P. 428. <a href="https://doi.org/10.21883/FTT.2022.04.52182.251">https://doi.org/10.21883/FTT.2022.04.52182.251</a></i></p> <p>15. <i>Kashida S., Kobayashi Y. // J. Phys.: Condens. Matter. 1999. V. 11, No 4. P. 1027. <a href="https://doi.org/10.1088/0953-8984/11/4/010">https://doi.org/10.1088/0953-8984/11/4/010</a></i></p> <p>16. <a href="https://materialsproject.org/materials/mp-865274#thermodynamic_stability">https://materialsproject.org/materials/mp-865274#thermodynamic_stability</a></p> <p>17. <i>Johnson K.A., Ashcroft N.W. // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 15548. <a href="https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.15548">https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.15548</a></i></p> <p>18. <i>Mott N.F., Davis E.A. Electronic Processes in NonCrystalline Materials, 2nd ed. Oxford Univ. Press. New York. 2012. 590 p. ISBN 978-0-19-964533-6</i></p> <p>19. <i>Pollak M. // Philos. Mag. 1971. V. 23. P. 519. <a href="http://dx.doi.org/10.1080/14786437108216402">http://dx.doi.org/10.1080/14786437108216402</a></i></p>
4	<p>Layihənin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə olunan üsul və yanaşmalar (burada doldurmalı)</p> <p>Fiziki və kimyəvi modelləşdirmə, kvant-kimyəvi hesablama üsulu, 2D nanomodellərin seçilməsi və hesablanması, elektron quruluşunun qeyri-empirik hesablanması üsulları, dielektrik spektroskopiya, lokal halların hoppanma nəzəriyyəsi, dəyişən cərəyanda monokristal nümunələrin tezlikdən asılılığının tədqiqi.</p>
5	<p>Layihə üzrə elmi nəşrlər (məqalələr, monoqrafiyalar, icmalar, 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 cari mərhələsi üzrə 2 məqalə dərc edilib</p> <p><b>1.</b> M.M. Асадов, С.Н. Мустафаева, С.С. Гусейнова, В.Ф. Лукичев. Моделирование дефектной структуры суперъячейки и явления переноса в TlInTe2 // Микроэлектроника. 2023. Том 52. № 1. С. 46–57. <a href="https://doi.org/10.31857/S0544126922700181">https://doi.org/10.31857/S0544126922700181</a>, EDN: CXXQYI (cari mərhələ) Fayl yükləmə linki: <a href="https://sciencejournals.ru/view-issue/?j=mikelek&amp;y=2023&amp;v=52&amp;n=1">https://sciencejournals.ru/view-issue/?j=mikelek&amp;y=2023&amp;v=52&amp;n=1</a></p> <p><b>2.</b> С.Н. Мустафаева, М.М. Асадов, С.О. Маммадова, С.С. Гусейнова, В.Ф. Лукичев. Диэлектрическая спектроскопия и транспортные свойства легированного Yb монокристалла TlInS2 // Материалы международной научно-практической онлайн-конференции. «Междисциплинарные исследования науки, техники и образования (НТО-1)». 16 февраля 2023 г. г. Грозный, 2023, 394 с. С. 106-111. <a href="https://doi.org/10.34708/GSTOU.2023.65.19.017">https://doi.org/10.34708/GSTOU.2023.65.19.017</a> (cari mərhələ) Fayl yükləmə linki: <a href="https://cloud.mail.ru/stock/3J3eFyXqA5qtJSiqRRqB1Kuj">https://cloud.mail.ru/stock/3J3eFyXqA5qtJSiqRRqB1Kuj</a></p>
6	<p>İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər (burada doldurmalı) Yox</p>
7	<p>Layihə üzrə ezamiyyətlər</p>



	<i>(burada doldurulmalı)</i> Yox
8	Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak <i>(burada doldurulmalı)</i> Yox
9	Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak <i>(burada doldurulmalı)</i> Yox
10	Layihə mövzusu üzrə elmi məruzələr (seminarlar, konfranslar, dəyirmi masalar və s. çıxışlar) <i>(burada doldurulmalı)</i> Yox
11	Layihə üzrə əldə olunmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar <i>(burada doldurulmalı)</i> Yox
12	Yerli həmkarlarla əlaqələr <i>(burada doldurulmalı)</i> Layihə üzrə yerli həmkarlarla cari ildə 2 məqalə dərc edilib
13	Xarici həmkarlarla əlaqələr <i>(burada doldurulmalı)</i> Layihə üzrə xarici həmkarlarla cari ildə 2 məqalə dərc edilib
14	Layihə mövzusu üzrə kadr hazırlığı <i>(burada doldurulmalı)</i> Yox
15	Sərgilərdə iştirak <i>(burada doldurulmalı)</i> Yox
16	Təcrübəartırmada iştirak və təcrübə mübadiləsi <i>(burada doldurulmalı)</i> Yox
17	Layihə mövzusu ilə bağlı elmi-kütləvi nəşrlər, kütləvi informasiya vasitələrində çıxışlar, yeni yaradılmış internet səhifələri və s. <i>(burada doldurulmalı)</i> Yox

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

Tarix \_\_\_\_\_

QEYD: bütün hallarda uyğun olan bəndlər doldurulmalıdır.

