

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

Əlyazması hüququnda

**QURĞUŞUN-BİSMUT TELLURİDLƏRİ ƏSASINDA
TOPOLOJİ İZOLYATOR XASSƏLİ MADDƏLƏRİN
ALINMASI VƏ FAZA DİAQRAMLARININ
MODELLƏŞDİRİLMƏSİ**

İxtisas: 2307.01 – Fiziki kimya

Elm sahəsi: Kimya

İddiaçı: **Aytən İsmət qızı Ağazadə**

Fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi almaq üçün
təqdim olunmuş dissertasiyanın

AVTOREFERATI

Bakı – 2025

Dissertasiya işi Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi akademik M.Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun “Funksional qeyri-üzvi maddələrin termodinamikası” laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

Elmi rəhbər:

kimya elmləri doktoru, professor
Asif Nəsim oğlu Məmmədov

Elmi məsləhətçi:

AMEA-nın müxbir üzvü,
kimya elmləri doktoru, professor
Məhəmməd Baba oğlu Babanlı

Rəsmi opponətlər:



AMEA-nın müxbir üzvü,
kimya elmləri doktoru, professor
Tofiq Abbasəli oğlu Əliyev

kimya elmləri doktoru, professor
Yasin İsa oğlu Cəfərov

kimya üzrə fəlsəfə doktoru
Qənirə Babəşirin qızı Balakışiyeva

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Ali Attestasiya Komissiyasının Bakı Dövlət Universitetinin nəzdində fəaliyyət göstərən ED 2.16 Dissertasiya şurası

Dissertasiya şurasının
sədri:

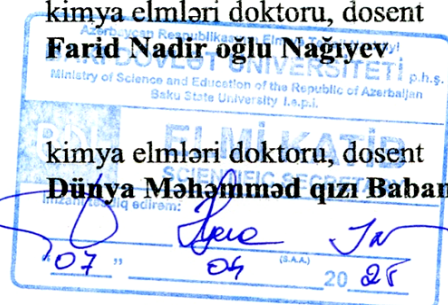
kimya elmləri doktoru, professor
İbrahim Qərib oğlu Məmmədov

Dissertasiya şurasının
elmi katibi:

kimya elmləri doktoru, dosent
Fərid Nadir oğlu Nağıyev

Elmi seminarın sədri:

kimya elmləri doktoru, dosent
Dünya Məhəmməd qızı Babanlı



İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

Mövzunun aktuallığı və işlənmə dərəcəsi. Müasir dövrdə bir çox digər elm sahələri kimi kimya da sürətli inkişaf yolu keçməkdədir. Buna səbəb informasiya texnologiyalarının elmə tətbiqi, yüksək həssaslıqlı ölçmə cihazlarının yaradılması, keyfiyyətə yeni funksional xassələr nümayiş etdirən maddələrin aşkar edilməsi olmuşdur. Belə materialların kəşfi, həmçinin onların sintez üsullarının hazırlanması və xassələrinin optimallaşdırılması istiqamətində aparılan tədqiqatlar müasir kimyanın əsas perspektiv inkişaf istiqamətlərindəndir. Bu prosesləri reallaşdırmaq və optimallaşdırmaq üçün riyazi modelləşdirilmə, o cümlədən faza diaqramlarının 3D modelləşdirilməsi mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Bu səbəbdən yeni mürəkkəb tərkibli qeyri-üzvi funksional materialların axtarışı, sintezi və müvafiq sistemlərin faza diaqramlarının modelləşdirilməsi müasir materialşünaslığın aktual problemlərindəndir.

Əsrimizin ilk onilliyində maddənin yeni kvant halının – topoloji izolyatorun¹ (Tİ) kəşfi elektron texnologiyalarının inkişafına güclü təkan verdi. Tİ materialları qeyri-adi kvant xüsusiyyətləri ilə fərqlənilirlər – onlar həcmdə dielektrik olsalar da, səthdə yüksək elektrik keçiriciliyinə malikdirlər. Tİ yüksək temperaturlara qədər sabit saxlanıla bilən topoloji xassələrə malik olduqlarından onlar kompüter texnologiyaları və mikroelektronikada istifadə üçün böyük maraq kəsb edirlər. Həmçinin topoloji izolyatorların spin xarakteri məlumatları saxlamaq və ötürmək üçün spintronika sahəsində parlaq perspektivlər vəd edir².

Ədəbiyyat məlumatlarının təhlili göstərir ki, $A^{IV}Te-B^V_2Te_3$ (A^{IV} - Ge, Sn, Pb; B^V - Sb, Bi) sistemlərində əmələ gələn tetradimitəbənzər laylı quruluşlu üçlü birləşmələr ($A^{IV}B^V_2Te_4$, $A^{IV}B^V_4Te_7$, $A^{IV}B^V_6Te_{10}$, $A^{IV}B^V_8Te_{13}$) topoloji izolyatorlar kimi geniş

tədqiq edirlər. Müvafiq sistemlərin faza tarazlıqları və termodynamik xüsusiyyətləri barədə məlumatlar əsasında yeni birləşmələr, bərk məhlullar və aralıq fazaların axtarışı tədqiq olunan maddələrin

¹ Moore, J.E. The Birth of Topological Insulators // - London: Nature, - 2010. 464, - p.194- 198.

² Hasan, M.Z. Topological Insulators // Review of Modern Physics, - 2010. 82(4), - p. 3045-3067.

əhatəsini əhəmiyyətli dərəcədə genişləndirir³.

Bu baxımdan $A^{IV}Te$ və $B^V_2Te_3$ tipli birləşmələrdən təşkil olunmuş kvaziüçlü sistemlər yeni topoloji izolyator xassəli materialların alınması üçün olduqca cəlbədicə obyektlərdir. Belə sistemlərin sərhəd $A^{IV}Te$ - $B^V_2Te_3$ kvazibinar hissələrində mövcud olan laylı quruluşlu üçlü birləşmələr əsasında geniş bərk məhlul sahələri əmələ gəlməsi gözlənilir ki, bunun əsasında da tərkibi dəyişməklə funksional xassələri optimallaşdırmaq mümkündür. Həmçinin ədəbiyyat məlumatları göstərir ki, bizim tədqiqatlara qədər bu tip sistemlərdə faza tarazlıqları praktiki olaraq öyrənilməmişdir.

Digər tərəfdən Tİ xassələrinə malik olan yeni fazaların axtarışı, sintezi və dizaynı üçün tarazlığa maksimal yaxın xəlitələrin alınması və faza tarazlıqlarının tədqiqi üçün yeni yanaşmalardan o cümlədən, qeyri-səlis sistem prinsipindən istifadə edilməsi istiqamətində müəyyən tədqiqatlar aparılmışdır. Son illərdə məhdud eksperimental məlumatların termodinamik modellərə daha dəqiq uyğunlaşdırılması məqsədilə “Multipurpose Genetics Algorithm” (MGA) alqoritmindən istifadə edərək faza tarazlıqlarının koordinatlarının optimallaşdırılması həyata keçirilir⁴.

Tədqiqatın obyekti və predmeti. Qeyd edilənləri nəzərə alaraq dissertasiya işində tədqiqat obyektləri kimi $PbTe$ - Bi_2Te_3 - Sb_2Te_3 və $SnTe$ - $PbTe$ - Bi_2Te_3 sistemləri götürülmüşdür, tədqiqat predmeti isə həmin sistemlərdə faza tarazlıqları mənzərələrinin müəyyən edilməsi və faza diaqramlarının riyazi modelləşdirilməsi olmuşdur.

Tədqiqatın məqsədi və vəzifələri. Dissertasiya işinin məqsədi $PbTe$ - Bi_2Te_3 - Sb_2Te_3 və $SnTe$ - $PbTe$ - Bi_2Te_3 sistemlərində fiziki-kimyəvi qarşılıqlı təsir xarakterinin müəyyən edilməsi, onların T-x-y faza diaqramlarının modelləşdirilməsi və termodinamik analizi olmuşdur.

Bu məqsədə nail olmaq üçün işdə aşağıdakı **konkret məsələlər**

³ Babanly, M.B. Phase diagrams in materials science of topological insulators based on metal chalcogenides / M.B. Babanly, E.V. Chulkov, Z.S. Aliev [et al.] // Russian Journal of Inorganic Chemistry, - 2017. 62 (13), - p. 1703–1729.

⁴ Babanly, N.B. Determination and modeling of the liquidus surface, vapor pressure and immiscibility boundaries in the Cu–Pb–S system / N.B. Babanly, M.V. Bulanova, A.N. Mustafayeva // Azerbaijan Chemical Journal, –2021. № 4. — p. 35–42.

qoyulmuş və həll edilmişdir:

➤ $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemlərinin tarazlıq halına maksimal yaxınlaşdırılmış nümunələrinin alınması fiziki-kimyəvi tədqiqi;

➤ Bu sistemlərdə faza tarazlıqları mənzərələrinin müəyyən edilməsi, onların likvidus səthlərinin proyeksiyalarının, faza diaqramlarının müxtəlif politermik və izotermik kəsiklərinin qurulması, non- və monovariant tarazlıqların tiplərinin və koordinatlarının təyini;

➤ $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemlərinin faza diaqramlarının analitik 3D modelləşdirilməsi və termodinamiki analizi.

Tədqiqat metodları. Dissertasiyanın mövzusu üzrə təcrübi tədqiqatlar fiziki – kimyəvi analizin ənənəvi metodları olan differensial termiki analiz (DTA), differensial skanedici kalorimetriya (DSK), rentgenfaza analizi (RFA), skanedici elektron mikroskopiya (SEM) və mikroquruluş analizi üsulları ilə aparılmışdır. DTA "TC-08 Thermocouple Data Logger" elektron məlumat qeydedicisi əsasında hazırlanmış çoxkanallı qurğuda, həmçinin "NETZS8CH 404 F1 Pegasus system" və LINSEIS HDSC PT1600 qurğularında aparılmışdır. Ovuntu difraktoqramları Almaniyanın Bruker firmasının D2 Phaser cihazında çəkilmiş və həmin tip difraktometrlərin kompüter təminatı proqramı ilə analiz edilmişdir. Mikroquruluş analizi üçün Thermo Scientific UltrDry Compact EDS detektoru ilə təchiz olunmuş Tescan Vega 3 SBH markalı skanədicisi elektron mikroskopundan istifadə edilmişdir.

Tədqiqatlarda fiziki-kimyəvi analizin və faza tarazlıqları termodinamikasının əsasları, həmçinin qeyri-səlis məntiq yanaşması prinsipi istifadə olunmuşdur. 3D modellərin görüntülərinin alınması üçün OriginLab kompüter proqramından istifadə edilmişdir.

Müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar.

1. $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemlərinin faza diaqramları, onların bir sıra poli- və izotermik kəsikləri, likvidus səthlərinin proyeksiyaları;

2. Tədqiq olunan sistemlərin faza diaqramlarında aşkar edilmiş yeni fazaları, onların ilkin kristallaşma sahələri, non- və monovariant tarazlıqların tipləri və koordinatları;

3. Hər iki sistemdə müəyyən olunmuş kation əvəzləməli bərk məhlulların termiki və kristalloqrafik göstəriciləri;

4. $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemlərində müxtəlif fazaların ilkin kristallaşma sahələrinin analitik ifadələri və 3D modelləri.

Tədqiqatın elmi yeniliyi. Dissertasiya işində aşağıdakı yeni elmi nəticələr alınmışdır:

➤ $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemlərində faza tarazlıqlarının yeni etibarlı mənzərələri alınmışdır. Hər iki sistemin likvidus səthinin proyeksiyası, faza diaqramının bir sıra politermik və izotermik kəsikləri qurulmuşdur. Göstərilmişdir ki, hər iki sistem müvafiq dördkomponentli sistemlərin kvaziüçlü müstəviləridir;

➤ Müəyyən edilmişdir ki, $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ sistemində PbBi_2Te_4 , PbBi_4Te_7 və $\text{PbBi}_6\text{Te}_{10}$ birləşmələri əsasında geniş bərk məhlul sahələri, $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemində isə həmin üçlü birləşmələrlə onların qalay analoqları arasında fasiləsiz bərk məhlul sıraları mövcuddur. $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemində həmçinin $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ və $\text{Sn}_3\text{Bi}_2\text{Te}_6$ birləşmələri əsasında $\text{Sn} \rightarrow \text{Pb}$ əvəzləməli geniş homogenlik sahələri aşkar edilmişdir;

➤ Hər iki kvaziüçlü sistemdə maye fazadan ilkin olaraq 6 fazanın ilkin kristallaşması müəyyən edilmiş, həmin fazaların likvidus səthlərini sərhədləndirən monovariant və nonvariant tarazlıqlar müəyyən olunmuş, müvafiq əyrilərin və nöqtələrin koordinatları təyin olunmuşdur;

➤ Tədqiq olunan sistemlərdə üçlü birləşmələr əsasında bərk məhlulların müxtəlif tərkibli nümunələri fərdi halda alınmış, toz rentgenoqrafikası üsulu ilə onların tetradimitəbənzər laylı quruluşda kristallaşmaları müəyyən edilmiş, qəfəs parametrləri hesablanmışdır;

➤ Faza tarazlıqlarının termodinamik kriteriyaları və qeyri-səlis məntiq yanaşması prinsipləri əsasında $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemlərində binar və üçlü birləşmələr əsasında bərk məhlulların likvidus və solidus səthləri (əyriləri) dəqiqləşdirilmişdir;

➤ Hər iki kvaziüçlü sistemin T-x-y diaqramlarında bütün fazaların likvidus səthlərinin analitik ifadələri alınmış, 3D modelləri işlənmiş və vizuallaşdırılmışdır.

Tədqiqatın nəzəri və praktiki əhəmiyyəti. Təcrübi tədqiqatların nəticələri əsasında qurulmuş faza diaqramları və onların Multi 3D modelləri laylı quruluşlu mürəkkəb xalkogenidlərin və onlar əsasında funksional materialların kimyasına və materialşünaslığına töhfədir. Tədqiq edilən sistemlərdə aşkar olunan yeni dəyişən tərkibli fazalar potensial topooloji izolyator və termoelektrik materialları kimi praktiki əhəmiyyət kəsb edirlər.

Tədqiqatın praktiki əhəmiyyəti ondan ibarətdir ki, tədqiqatlar nəticəsində qurulan faza diaqramları, müxtəlif bərk məhlul fazalarının kristalloqrafik göstəriciləri, fazaların termodinamik xassələri fundamental fiziki-kimyəvi parametrlər kimi müvafiq elektron-informasiya sistemlərinə və məlumat kitablarına salına bilər.

Aprobasiya və tətbiq. Dissertasiyanın mövzusunə dair 15 elmi əsər çap olunmuşdur. Onlardan 6 məqalə Web of Science və Scopus beynəlxalq bazalarında indekslənen jurnallarda çap olunmuşdur. 9 elmi əsər beynəlxalq səviyyəli konfranslarda konfrans materialı və məruzə tezisi kimi dərc olunmuşdur.

Dissertasiya işinin əsas nəticələri aşağıdakı elmi konfranslarda məruzə və müzakirə edilmişdir: 9th Rostocker International Conference: “Thermophysical Properties for Technical Thermodynamics”, Rostock, Germany (15 oktyabr 2020); 10th Rostocker International Conference: “Thermophysical Properties for Technical Thermodynamics”, Rostock, Germany (09-10 sentyabr 2021); “Müasir təbiət və iqtisad elmlərinin aktual problemləri” mövzusunda beynəlxalq elmi konfrans, Gəncə, Azərbaycan (06-07 may 2021); “1st International congress on natural sciences”, (ICNAS)- Erzurum, Turkey (10-12 sentyabr 2021); XI Международная научная конференция “Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация как форма самоорганизации вещества” Иваново, Россия (20-24 sentyabr 2021); “Физико-химические процессы в конденсированных средах и на межфазных границах”, Воронеж (04-07 oktyabr 2021); “Müasir təbiət və iqtisad elmlərinin aktual problemləri” mövzusunda beynəlxalq elmi konfrans, Gəncə, Azərbaycan (06-07 may 2022); XXIII International Conference on Chemical Thermodynamics, Kazan, Russia (22-27 avqust 2022); “Müasir təbiət və iqtisad elmlərinin aktual problemləri” mövzusunda beynəlxalq elmi konfrans, Gəncə,

Azərbaycan (05-06 may 2023).

Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilatın adı. Dissertasiya işi Elm və Təhsil Nazirliyi akad. M. Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun “Funksional qeyri-üzvi maddələrin termodinamikası” laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

Müəllifin şəxsi iştirakı. Dissertasiya işinin yerinə yetirilməsi və qarşıya qoyulan məsələlərin həll edilməsində aparıcı rol iddiaçıya məxsusdur. Müəllif dissertasiya işində təcrübi tədqiqatların aparılması, alınan nəticələrin ümumiləşdirilərək yekunlaşdırılması və materialların çapa hazırlanmasında bilavasitə iştirak etmişdir. Həmmüəllif olduğu elmi əsərlərdə müəllifin payı həlledici olmuşdur.

Dissertasiyanın struktur bölmələrinin ayrılıqda həcmi qeyd olunmaqla dissertasiyanın işarə ilə ümumi həcmi. Dissertasiya (170078 işarə) girişdən (11051 işarə), dörd fəsildən (birinci fəsil- 52270 işarə, ikinci fəsil- 36303 işarə, üçüncü fəsil- 32173 işarə, dördüncü fəsil- 34861 işarə), əsas nəticələrdən (3420 işarə) və istifadə edilən elmi ədəbiyyat siyahısından ibarətdir. Dissertasiyaya 55 şəkil və 6 cədvəl daxil edilmişdir.

Giriş hissəsində (11051 işarə) mövzunun aktuallığı və işlənmə dərəcəsi, tədqiqatın obyektı, predmeti, məqsəd və vəzifələri, tədqiqat metodları, müdafiyyə çıxarılan əsas müddəalar, tədqiqatın elmi yeniliyi, tədqiqatın nəzəri və praktik əhəmiyyəti, işin aprobasiyası və tətbiqi, aparılan tədqiqatlarda iddiaçının şəxsi iştirakı haqqında məlumat verilmişdir.

Birinci fəsildə (52270 işarə) əsasən son 10 ilin ədəbiyyat məlumatları və ədəbiyyat məlumatlarının təhlili verilmişdir.

İkinci fəsildə (36303 işarə) dissertasiya işində istifadə olunan sintez və fiziki-kimyəvi analiz metodlarının şərhı verilmişdir.

Üçüncü fəsildə (32173 işarə) $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemlərinin T-x-y diaqramları, izotermik və politermik kəsikləri, fazaların ilkin kristallaşma sahələri, monovariant və nonvariant tarazlıqların tipləri və koordinatları verilmişdir.

Dördüncü fəsildə (34861 işarə) həmin kvaziüçlü sistemlərin faza diaqramlarının analitik 3D modelləşdirilməsi və termodinamiki analizinə aid nəticələr verilmişdir.

Sonda– *Nəticələr* (3420 işarə) bölməsində aparılan tədqiqatların yekunu və alınmış nəticələr öz əksini tapmışdır.

İŞİN ƏSAS MƏZMUNU

Girişdə dissertasiya işinin aktuallığı əsaslandırılmış, işin məqsədi, elmi yeniliyi, praktiki əhəmiyyəti və müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar verilmişdir.

Dissertasiya işinin **birinci fəslində** tədqiqat obyektləri kimi seçilmiş $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemlərinin ilkin komponentlərinin əmələ gəldiyi binar, eləcə də sərhəd kvazibinar sistemlərdə faza tarazlıqları, aralıq fazaların termiki, kristalloqrafik, termodinamik və s. kimi xassələrinin öyrənilməsi ədəbiyyat məlumatları ətrafı şərhləndirilmişdir.

Bu fəsildə eyni zamanda tetradimitəbənzər laylı quruluşlu telluridlərin müasir dövrdə tədqiq olunan termoelektrik və topoloji izolyator xassələri barədə məlumat verilmiş, dissertasiya mövzusunun seçilməsi əsaslandırılmışdır.

İkinci fəsildə metal xalkogenidlərinin sintez metodları haqqında məlumat verilmiş və faza tarazlığının öyrənilməsində istifadə olunan DTA, RFA, mikroquruluş və SEM metodları qısa şərhləndirilmişdir. Bu fəsildə eyni zamanda faza diaqramlarının hesablanması və modelləşdirilməsi üsulları haqqında da məlumat verilmişdir.

Tədqiqatları aparmaq üçün ilk öncə üçlü sistemləri təşkil edən ilkin binar birləşmələr – PbTe , SnTe , Sb_2Te_3 və Bi_2Te_3 sintez olunmuşdur. Sintez yüksək təmizliyə malik elementar komponentlərin birgə əridilməsi ilə birzonalı sobada kvarts ampulalarda aparılmışdır. Nümunələr ərimə temperaturundan $\sim 50^\circ$ yuxarı temperaturda 4 saat ərzində sintez edilmiş və tədricən otaq temperaturuna qədər soyudulmuşdur. Sintez olunmuş nümunələr DTA və RFA üsulları ilə identifikasiya edilmişdir.

Tədqiq olunan hər iki sistemin xəlitələri əvvəlcədən sintez olunmuş ilkin binar birləşmələrdən istifadə etməklə hazırlanmışdır. Nümunələr üçlü sistemlərin müxtəlif kəsikləri üzrə 5-10 mol% tərkib intervalı ilə hər biri 0,5-1,0 qram olmaqla hazırlanmışdır. Sintez üçün stexiometrik nisbətdə götürülmüş ilkin binar birləşmələr kvarts ampulalara doldurularaq vakuumlaşdırılmış, ampulaların ağzı əridilərək bağlanmışdır.

Tədqiq etdiyimiz sistemlərdəki üçlü birləşmələr laylı tetradi-mitəbənzər quruluşa malikdirlər. Bu laylar arasında zəif Van-der-Vaals rabitəsi, layların daxilində isə atomlar arasında güclü kimyəvi rabitə mövcuddur. Belə quruluşlarda layların daxilində adi kristal-larda olduğu kimi diffuziya yüksək temperaturalarda güclüdür ki, bu da termiki emal vasitəsilə laydaxili tarazlıq halının yaranmasını tə-min edir. Laylararası rabitə isə çox zəif olduğu üçün müxtəlif laylar arasında diffuziya tormozlanır və nümunənin bütövlükdə tarazlıq halına gətirilməsinə mane olur.

Qeyd edilənlər göstərir ki, bu sistemlərin sintezini ənənəvi bir-gə əridilmə, soyudulma və termiki emal yolu ilə aparmaq kifayət qə-dər effektiv deyil. Bu səbəbdən nümunələrin maye ərintiləri likvidus-dan 50-100 K yuxarı temperaturda 3-4 saat saxladıqdan sonra am-pulanı soyuq suya atmaqla tablandırılmışdır. Maye ərintinin yüksək sürətlə soyudulması kristallaşma prosesinin davam etməsinə və ilkin olaraq alınmış nano- və mikrokristalların böyüməsinə mane olur. Ona görə də alınmış narın kütlənin termiki emalı daha effektiv olur. Bu qayda ilə alınmış nümunələri tarazlıq halına maksimal yaxınlaş-dırmaq üçün onlar tərkibdən asılı olaraq solidusdan ~30-50 K aşağı-da 30-90 gün ərzində termiki emaldan keçirilmişdir. Nümunələri maye ərinti halından tablandırıdıda, ərintidə sürətli tam kristallaşma nəticəsində yaranan kiçik kristalcıqların təmas sahələri adi soyuma-da alınanlardan qat-qat çox olur ki, bu da termiki emal vasitəsilə tarazlıq halında olan fazaların əmələ gəlməsini xeyli asanlaşdırır.

Üçüncü fəsildə $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemlərində faza tarazlıqlarının təcrübi tədqiqinin nəticələri verilir.

Bu sistemlərin tədqiqinin nəticələri [1-3, 6-10, 13] işlərində öz əksini tapmışdır.

Dördüncü fəsildə $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ kvaziüçlü sistemlərinin faza diaqramlarının analitik 3D modelləşdi-rilməsi və termodinamiki analizinə aid nəticələr verilmişdir.

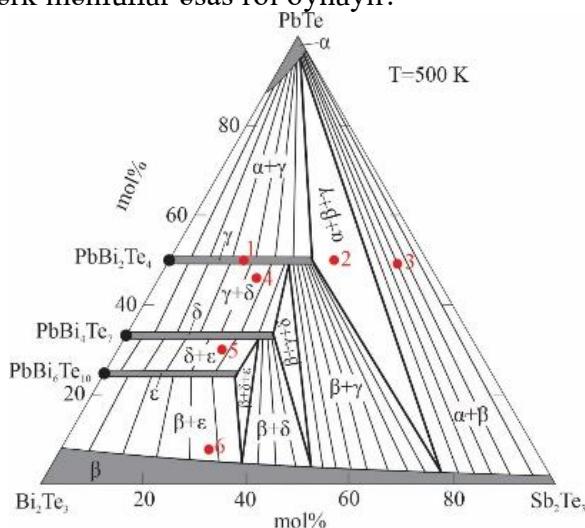
Bu sistemlərin tədqiqinin nəticələri [4, 5, 11, 12, 14, 15] işlə-rində öz əksini tapmışdır.

$\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ sistemində faza tarazlıqları.

Sintez olunmuş və termiki emaldan keçirilmiş nümunələrin 2-ci fəsildə göstərilən üsullarla tədqiqinin nəticələrinin və sərhəd

kvazibinar sistemlər üzrə ədəbiyyat məlumatlarının birgə işlənməsi ilə bu sistemdə faza tarazlıqlarının ümumi daxili tənzimlənmiş mənzərəsi əldə edilmişdir.

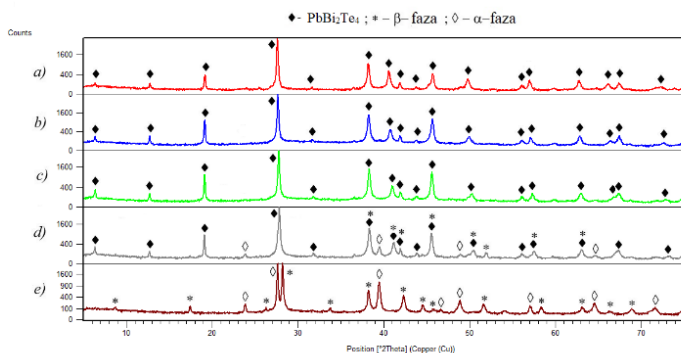
Bərkfaza tarazlıqları. Şəkil 1-də PbTe-Bi₂Te₃-Sb₂Te₃ sisteminin 500 K-də bərkfaza tarazlıqları diaqramı verilir (bu şəkildə, həmçinin sonrakı şəkillərdə, cədvəllərdə və mətnə də fazalar aşağıdakı kimi işarələnmişdir: α -PbTe; β -Bi_{2-x}Sb_xTe₃; γ -PbBi₂Te₄; δ -PbBi₄Te₇; ε -PbBi₆Te₁₀ əsasında bərk məhlullar). Göründüyü kimi sistemdə PbBi₂Te₄, PbBi₄Te₇, PbBi₆Te₁₀ birləşmələri əsasında geniş Bi→Sb əvəzlənmə bərk məhlulları sahələri mövcuddur (γ -, δ -, ε -fazalar). Bununla yanaşı Bi₂Te₃-Sb₂Te₃ sərhəd sistemində mövcud olan fasiləsiz bərk məhlul sahəsi qatılıq üçbucağı daxilinə nüfuz edir və eni 2-8 mol% olan homogenlik zolağı (β -faza) əmələ gətirir, PbTe əsasında da məhdud həllolma (α -faza) müşahidə olunur. Diaqramdan göründüyü kimi bərkfaza sahələrin qarşılıqlı təsiri nəticəsində 7 ikifazlı sahə əmələ gəlir: $\alpha+\gamma$, $\gamma+\delta$, $\delta+\varepsilon$, $\beta+\varepsilon$, $\beta+\delta$, $\beta+\gamma$, $\alpha+\beta$. Bu temperaturda sistemdə 3 üçfazlı sahə əmələ gəlir: $\alpha+\beta+\gamma$, $\beta+\gamma+\delta$, $\beta+\delta+\varepsilon$. Üçbucaqda faza tarazlıqlarını təhlil etdikdə görünür ki, heterogen faza sahələrinin yaranmasında stexiometrik tərkibli birləşmələr deyil, bərk məhlullar əsas rol oynayır.



Şəkil 1. PbTe-Bi₂Te₃-Sb₂Te₃ sisteminin 500 K-də bərkfaza tarazlıqları diaqramı

Şəkil 2-də verilən difraktoqramlarda uyğun olaraq bu tərkiblər göstərilmişdir: a) PbBi_2Te_4 birləşməsi, b) 80 mol% PbBi_2Te_4 , c) 50 mol% PbBi_2Te_4 , d) 40 mol% PbBi_2Te_4 , e) 20 mol% PbBi_2Te_4 .

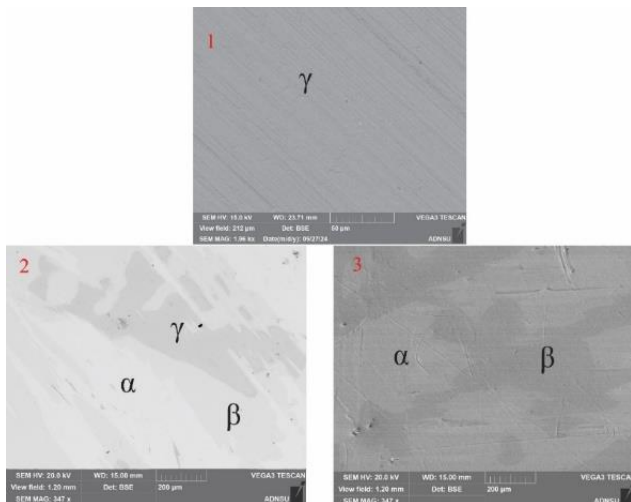
PbBi_2Te_4 – “ PbSb_2Te_4 ” kəsiyi üzrə termiki emaldan keçirilmiş 20, 30, 40, 50, 60, 80 mol% PbBi_2Te_4 tərkibli nümunələrin ovuntu difraktoqramları çəkilmişdir. Şəkil 2 (a)-da PbBi_2Te_4 birləşməsinin, şəkil 2 (b), (c)-də uyğun olaraq 80 və 50 mol% PbBi_2Te_4 tərkibli xəlitələrin difraksiya mənzərələri verilmişdir. Göründüyü kimi 50 və 80 mol% PbBi_2Te_4 tərkibli xəlitələr PbBi_2Te_4 birləşməsinin difraksiya mənzərəsi ilə keyfiyyətcə eyni difraktoqramlara malikdir. Difraksiya xətləri PbBi_2Te_4 birləşməsinə nəzərən bir qədər sürüşür ki, bu da bərk məhlul əmələ gəlməsi nəticəsində qəfəs parametrlərinin dəyişməsilə bağlıdır.



Şəkil 2. Faza diaqramının PbBi_2Te_4 -“ PbSb_2Te_4 ” kəsiyi üzrə RFA nəticələri

20 və 40 mol% PbBi_2Te_4 (Şəkil 2 (e), (d)) tərkibli nümunələrin difraktoqramları onların bircinsli olmadığını göstərir. Apardığımız analizlər göstərdi ki, onlar müvafiq olaraq 2 və 3 fazalıdır. α fazanın əksəllənə bucaqları PbTe -un difraksiya xətləri ilə üst-üstə düşür, Sb_2Te_3 əsasında β fazanın difraksiya xətləri təmiz Sb_2Te_3 -ə nəzərən kiçik bucaqlar istiqamətində bir qədər sürüşür. Bu Bi_2Te_3 - Sb_2Te_3 sistemində fasiləsiz bərk məhlullar əmələ gəlməsi ilə əlaqədardır.

Şəkil 3. (1), (2) və (3) (Şəkil 1-də 1, 2 və 3) PbBi_2Te_4 – “ PbSb_2Te_4 ” kəsiyi üzrə bəzi nümunələrin SEM nəticələrini göstərir. Bu məlumatlar şəkil 1-də verilən mənzərəni təsdiq edir.

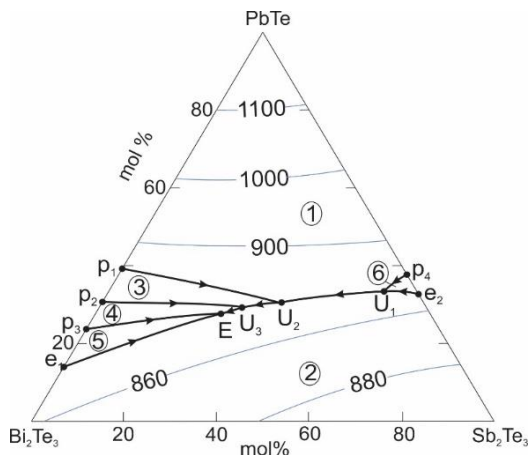


Şəkil 3. 1, 2 və 3 (bax şəkil 1.) nümunələrinin SEM mənzərələri.

Dissertasiya işində həmçinin müvafiq olaraq PbBi_4Te_7 - PbSb_4Te_7 və $\text{PbBi}_6\text{Te}_{10}$ - $\text{PbSb}_6\text{Te}_{10}$ kəsikləri boyunca bəzi ərintilərin toz RFA nəticələri, onlar əsasında əmələ gələn bərk məhlulların kristalloqrafik göstəriciləri və politermik kəsiklərin T-x diaqramları verilmiş və ətraflı şərh olunmuşdur.

Likvidus səthi. Tədqiq etdiyimiz bütün nümunələr üçün DTA, RFA və SEM nəticələrini, həmçinin sərhəd kvazibinar sistemlərdə faza tarazlıqlarına və aralıq fazaların xassələrinə aid ədəbiyyat məlumatlarını, izotermik kəsiyini birgə təhlil etməklə $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ sisteminin likvidus səthinin proyeksiyası qurulmuşdur (şəkil 4).

Görünür ki, o, 6 ilkin kristallaşma səthindən ibarətdir. Qatılıq üçbucağının sahəsinin çox böyük hissəsini ($>90\%$) α -və β -fazaların likvidus səthləri tutur (1,2 sahələri). γ -, δ - və ε -fazaların (3-5), həmçinin $\text{Pb}_2\text{Sb}_6\text{Te}_{11}$ birləşməsi əsasında η - fazanın ilkin kristallaşma sahəsi (6) nazik zolaqlar şəklində olub, bu fazaların tərkiblərindən kənarda yerləşir. Qeyd etdiyimiz likvidus səthləri bir-biri ilə bir sıra nonvariant tarazlıq nöqtələri və monovariant tarazlıq ayriləri ilə sərhədlənilir. Həmin tarazlıqların tipləri və temperaturları cədvəl 1-də göstərilmişdir.



Şəkil 4. PbTe-Bi₂Te₃-Sb₂Te₃ sisteminin likvidus səthinin proyeksiyası. İlkın kristallaşma sahələri: (1) α- faza; (2) β- faza; (3) γ- faza; (4) δ- faza; (5) ε- faza; (6) η- faza

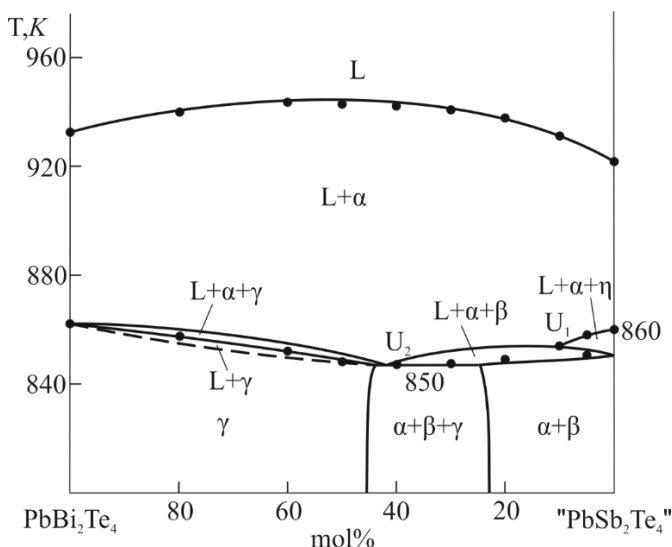
Cədvəl 1

PbTe-Bi₂Te₃-Sb₂Te₃ nonvariant və monovariant tarazlıqlar

Şəkil 5-də nöqtə və ya əyri	Tarazlıq	T, K
P ₁	$L + \alpha \leftrightarrow \gamma$ (PbBi ₂ Te ₄)	864
P ₂	$L + \gamma \leftrightarrow \delta$ (PbBi ₄ Te ₇)	856
P ₃	$L + \delta \leftrightarrow \varepsilon$ (PbBi ₆ Te ₁₀)	851
P ₄	$L + \alpha \leftrightarrow \eta$ (Pb ₂ Sb ₆ Te ₁₁)	860
e ₁	$L \leftrightarrow \varepsilon + \beta$	847
e ₂	$L \leftrightarrow \eta + \beta$	856
U ₁	$L + \eta \leftrightarrow \alpha + \beta$	854
U ₂	$L + \alpha \leftrightarrow \beta + \gamma$	850
U ₃	$L + \gamma \leftrightarrow \beta + \delta$	846
E	$L \leftrightarrow \beta + \delta + \varepsilon$	842
P ₄ U ₁	$L + \alpha \leftrightarrow \eta$	860-854
e ₂ U ₁	$L \leftrightarrow \eta + \beta$	856-854
U ₁ U ₂	$L \leftrightarrow \alpha + \beta$	854-850
P ₁ U ₂	$L + \alpha \leftrightarrow \gamma$	864-850
U ₂ U ₃	$L \leftrightarrow \beta + \gamma$	850-846
P ₂ U ₃	$L + \gamma \leftrightarrow \delta$	856-846
U ₃ E	$L \leftrightarrow \beta + \delta$	846-842
P ₃ E	$L + \delta \leftrightarrow \varepsilon$	851-842
e ₁ E	$L \leftrightarrow \beta + \varepsilon$	847-842

Şəkil 4 və cədvəl 1-də verilən məlumatlar göstərir ki, monovariant tarazlıq ayrılıqlarının qarşılıqlı təsiri nəticəsində sistemdə üç keçid tarazlığı (U_1 , U_2 , U_3) və bir üçlü evtektika (E) yaranır. P_4 və e_2 nöqtələrindən çıxan peritektika və evtektika ayrılıqlarının qovuşması və U_1 tarazlığının yaranması $Pb_2Sb_6Te_{11}$ birləşməsinin $PbTe$ - Sb_2Te_3 sistemində çox kiçik temperatur intervalında mövcud olması və bərkfazlı reaksiya üzrə parçalanması haqda ədəbiyyat məlumatlarını təsdiq edir.

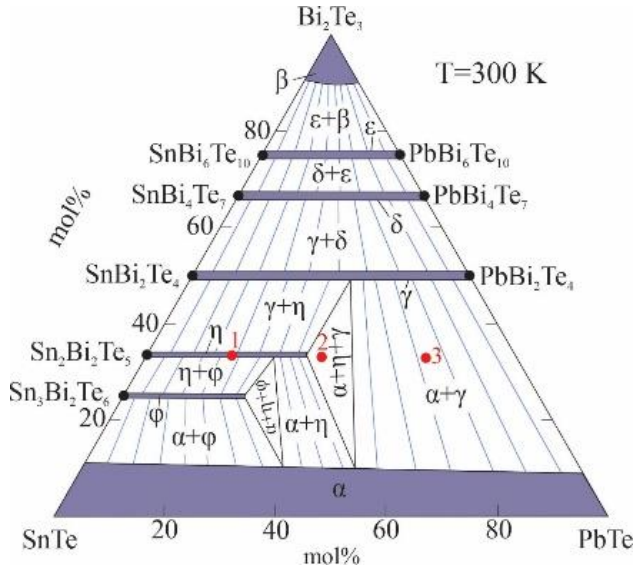
Faza diaqramının bəzi politermik kəsikləri. Şəkil 5-də $PbBi_2Te_4$ -“ $PbSb_2Te_4$ ” politermik kəsiyi verilmişdir. Bu kəsik bütünlüklə $PbTe$ əsasında α -fazanın ilkin kristallaşma sahəsində yerləşdiyindən mayedən ilkin olaraq bu faza kristallaşır və $L+\alpha$ sahəsi yaranır. Sonra kristallaşma (şəkil 5-də sağdan sola istiqamətdə) P_4U_1 , U_1U_2 və P_1U_2 monovariant reaksiyaları və U_1 , U_2 keçid reaksiyaları üzrə davam edir. Kristallaşma 0-25 mol% $PbBi_2Te_4$ qatılıq sahəsində $L \leftrightarrow \alpha + \beta$ (U_1U_2), 45-100 mol% $PbBi_2Te_4$ sahəsində isə $L + \alpha \leftrightarrow \gamma$ (P_1U_2) monovariant reaksiyaları üzrə başa çatır, müvafiq olaraq $\alpha + \beta$ qarışığı və bircinsli γ -faza alınır. Aralıq sahədə isə kristallaşma $L + \alpha \leftrightarrow \beta + \gamma$ (U_2) keçid reaksiyası üzrə başa çatır və $\alpha + \beta + \gamma$ üçfazlı halı reallaşır.



Şəkil 5. Faza diaqramının $PbBi_2Te_4$ -“ $PbSb_2Te_4$ ” politermik kəsiyi

SnTe-PbTe-Bi₂Te₃ sistemində faza tarazlıqları.

Bərkfaza tarazlıqları. SnTe-PbTe-Bi₂Te₃ sistemində bərkfaza tarazlıqları diaqramının ümumi mənzərəsini almaq üçün sintez olunmuş, termiki emaldan keçirilmiş nümunələr DTA, RFA və SEM üsulları ilə öyrənildikdən sonra bu nəticələr və sərhəd kvazibinar kəsiklər üzrə ədəbiyyat məlumatları ilə birgə analiz edilmişdir.

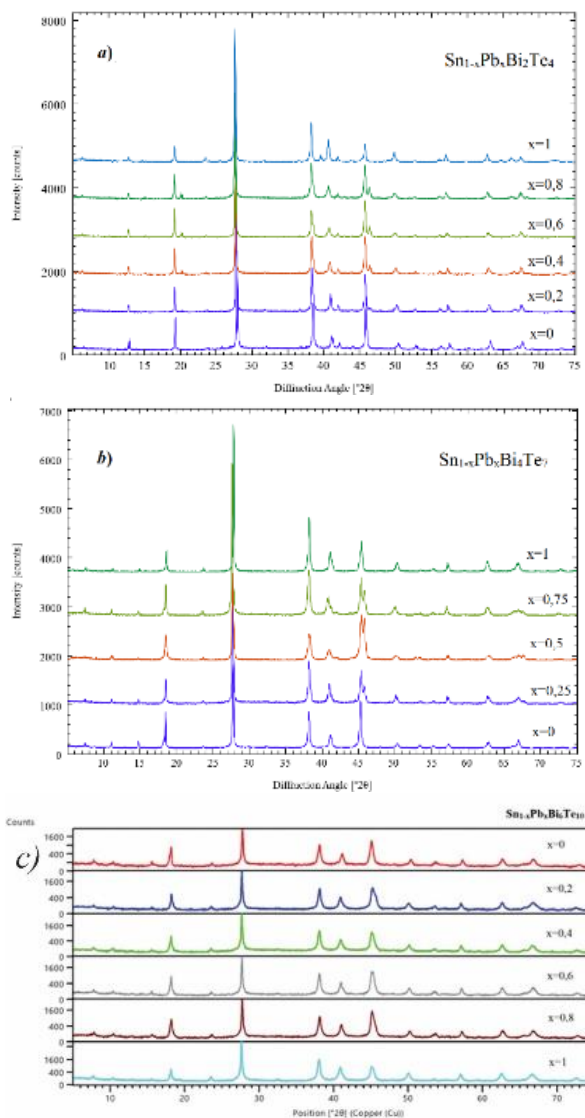


Şəkil 6. SnTe-PbTe-Bi₂Te₃ sisteminin bərk faza tarazlıqları diaqramı

Şəkil 6-da əks olunduğu kimi SnTe-PbTe-Bi₂Te₃ sistemində yeddi birfazlı sahə mövcuddur. Bi₂Te₃ əsasında β faza, PbTe əsasında α faza, müvafiq olaraq SnBi₂Te₄-PbBi₂Te₄, SnBi₄Te₇-PbBi₄Te₇, SnBi₆Te₁₀-PbBi₆Te₁₀ kəsikləri üzrə əmələ gələn fasiləsiz bərk məhlul sahələri – γ, δ, ε fazalar, Sn₂Bi₂Te₅, Sn₃Bi₂Te₆ birləşmələri əsasında η və φ fazaları mövcud olan birfazlı sahələrdir. Sayı səkkiz olmaqla aşağıdakı ikifazlı sahələr əmələ gəlir: ε+β, δ+ε, γ+δ, γ+η, η+φ, α+φ, α+η, α+γ sahələridir. Həmçinin sistemdə 2 üçfazlı sahə əmələ gəlir: α+η+φ, α+η+γ.

Şəkil 7 SnBi₂Te₄-PbBi₂Te₄ (a), SnBi₄Te₇-PbBi₄Te₇ (b), SnBi₆Te₁₀-PbBi₆Te₁₀ (c) kəsikləri üzrə təvəllül edilmiş nümunələrinin toz RFA nəticələrini göstərir. Diffraktoqramların müqayisəsindən aydın olur

ki, bütün aralıq tərkiblərin difraksiya mənzərələri keyfiyyətcə ilkin üçlü birləşmələrə bənzəyir və $R-3m$ fəza qrupu olan tetradimit tipli heksaqonal quruluşa aiddirlər.

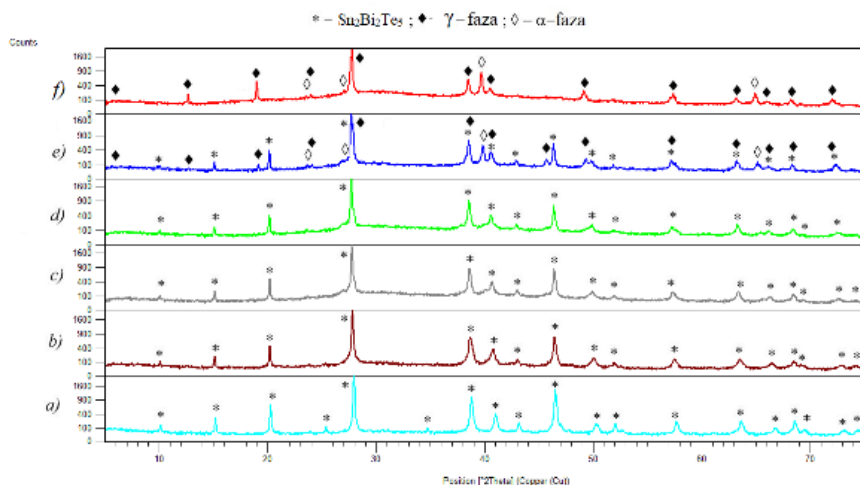


Şəkil 7. $\text{SnBi}_2\text{Te}_4\text{-PbBi}_2\text{Te}_4$ (a), $\text{SnBi}_4\text{Te}_7\text{-PbBi}_4\text{Te}_7$ (b), $\text{SnBi}_6\text{Te}_{10}\text{-PbBi}_6\text{Te}_{10}$ (c) sistemləri üçün RFA nəticələri

Şəkil 7-də verilən difraktoqramlarda bu tərkiblər göstərilmişdir: a) $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ birləşməsi; b) 80 mol% $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$; c) 60 mol% $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$; d) 50 mol% $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$; e) 40 mol% $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$; f) 20 mol% $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$.

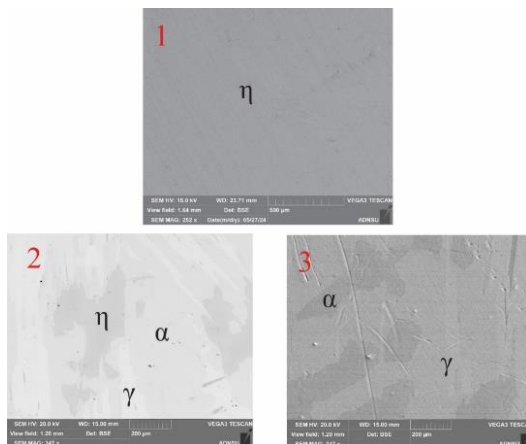
$\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ -“ $\text{Pb}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ ” kəsiyi üzrə termiki emaldan keçirilmiş 20, 40, 50, 60, 80 mol% $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ tərkibli nümunələrin ovuntu difraktoqramları çəkilmişdir. Şəkil 8 (a)-da $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ birləşməsinin, şəkil 8 (b), (c), (d)-də uyğun olaraq 80, 60 və 50 mol% $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ tərkibli xəlitələrin difraksiya mənzərələri verilmişdir. Göründüyü kimi 80, 60 və 50 mol% $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ tərkibli xəlitələr $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ birləşməsinin difraksiya mənzərəsi ilə keyfiyyətcə eyni difraktoqramlara malikdir. Difraksiya xətləri $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ birləşməsinə nəzərən bir qədər sürüşür ki, bu da bərk məhlul əmələ gəlməsi nəticəsində qəfəs parametrlərinin dəyişməsilə bağlıdır.

20 və 40 mol% $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ (Şəkil 8. (f), (e)) tərkibli nümunələrin difraktoqramları onların bircinsli olmadığını göstərir. Apardığımız analizlər göstərdi ki, onlar müvafiq olaraq 2 və 3 fazalıdır.



Şəkil 8. $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ -“ $\text{Pb}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ ” kəsiyi üzrə RFA nəticələri

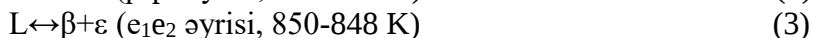
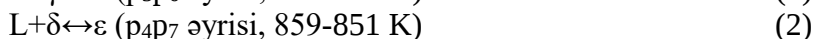
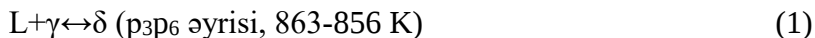
Şəkil 9-da 1, 2 və 3 (Şəkil 6-da 1, 2 və 3) $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ -“ $\text{Pb}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ ” kəsiyi üzrə bəzi nümunələrin SEM nəticələrini göstərir. Bu məlumatlar şəkil 6-da verilən mənzərəni təsdiq edir.



Şəkil 9. 1, 2 və 3 (bax şəkil 6) nümunələrinin SEM mənzərələri

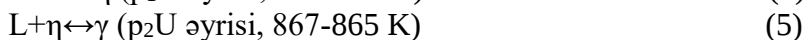
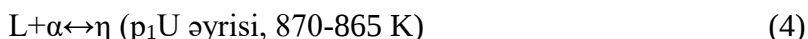
Likvidus səthi. Şəkil 11-də likvidus səthinin qatılıq üçbucağı üzərinə proyeksiyası verilir. Likvidus 6 ilkin kristallaşma sahəsindən ibarətdir. Yuxarıda (şək.11) göstərdiyimiz kimi SnTe-PbTe sisteminə əmələ gələn fasiləsiz bərk məhlulların homogenlik sahəsi qatılıq üçbucağı daxilinə kəskin nüfuz edir və həmin yan sistem boyunca geniş homogen zolaq (α -faza) əmələ gətirir. Bu fazanın ilkin kristallaşma sahəsi qatılıq üçbucağının daxilinə daha çox, ~ 62 - 63 mol% Bi_2Te_3 -ə qədər nüfuz edərək onun ümumi sahəsinin 85%-ni tutur. Bi_2Te_3 əsasında bərk məhlullar (β -faza) qatılıq üçbucağının həmin tərəsinə bitişik (6) sahəsində ərintidən ilkin kristallaşır.

Üçlü birləşmələr arasında fasiləsiz γ -, δ - və ε -bərk məhlul sıralarının likvidus səthləri nazik zolaqlar şəklində SnTe- Bi_2Te_3 və PbTe- Bi_2Te_3 yan tərəfləri arasında yerləşir (3-5 sahələri). Qeyd olunan likvidus səthləri bir-biri ilə aşağıdakı monovariant tarazlıq ayrılırları ilə sərhədlənilir:

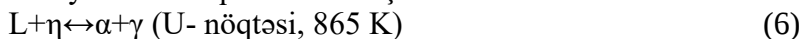


SnTe- Bi_2Te_3 sistemində əmələ gələn və peritektik reaksiya üzrə inkonqruent əriyən (870 K) $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ birləşməsi baxılan sistemdə geniş bərk məhlul sahəsi (η -faza) əmələ gətirir. Bu fazanın ilkin kristal-

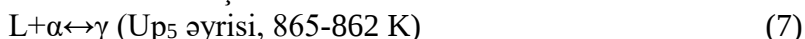
laşma sahəsi likvidus səthi üzərində (2) səthidir. Bu səthi sərhədləndirən monovariant peritektika əyriləri üzrə aşağıdakı tarazlıqlar mövcuddur:



Bu əyrilər U-nöqtəsində birləşərək



nonvariant keçid tarazlığı yaradır. U nöqtəsindən çıxan UP₅ əyrisi üzrə isə kristallaşma

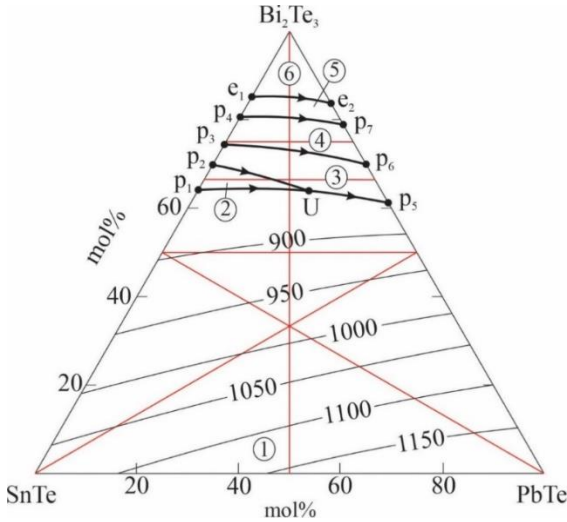


monovariant peritektik reaksiyası üzrə davam edir.

Diqqəti çəkən məqam odur ki, bütün bu monovariant tarazlıqlar (reaksiyalar) çox kiçik temperatur intervallarında baş verir. Bu, aralarında fasiləsiz bərk məhlullar əmələ gələn izostruktur üçlü birləşmələrin peritektik parçalanma reaksiyalarının temperaturlarının çox yaxın olması ilə əlaqədardır. Qeyd etmək lazımdır ki, ərimə (parçalanma) temperaturları belə yaxın olan birləşmələr arasında fasiləsiz bərk məhlulların əmələ gəlməsi, bir qayda olaraq likvidus (və ya peritektika) əyriləri üzərində ekstremum (əksər hallarda minimum) nöqtəsi ilə müşayiət olunur. Bizim halda isə bu müşahidə olunmur və bərk məhlulların əriməsi (daha doğrusu peritektik reaksiya üzrə parçalanmaqla əriməsi) ilkin üçlü birləşmələrin müvafiq ərimə (peritektika) nöqtələri arasında çox kiçik temperatur intervalında baş verir. Fikrimizcə bu onunla izah oluna bilər ki, SnBi₂Te₄-PbBi₂Te₄, SnBi₄Te₇-PbBi₄Te₇, SnBi₆Te₁₀-PbBi₆Te₁₀ kəsikləri üzrə eyni tipli kristal qəfəslərdə Sn→Pb əvəzləmələri az sayda atomları əhatə edir, kristal qəfəsdə hiss olunacaq gərginlik və deformasiya yaratmır. Ona görə də alınan bərk məhlullar ilkin birləşmələr arasında kvaziideal məhlul hesab oluna bilər. Çoxsaylı ədəbiyyat məlumatlarının araşdırılması göstərir ki, maye və bərk məhlullarda ideallıqdan kənaraçıxmalar kəskin olmadıqda və bir-birinə yaxın olduqda müvafiq sistemin faza diaqramında ekstremum nöqtəsi müşahidə olunmur.

Qurduğumuz likvidus səthi proyeksiyasından görünür ki, γ , δ , ε və η bərk məhlullar çox kiçik tərkib sahəsində qeyri-stexiometrik maye fazadan ilkin kristallaşır. (Şəkil 10-da, müvafiq olaraq, p₃p₂Up₅p₆, p₄p₃p₆p₇, p₄e₁e₂p₇ və p₁p₂U sahələri). Həm üçlü birləşmələrin, həm də

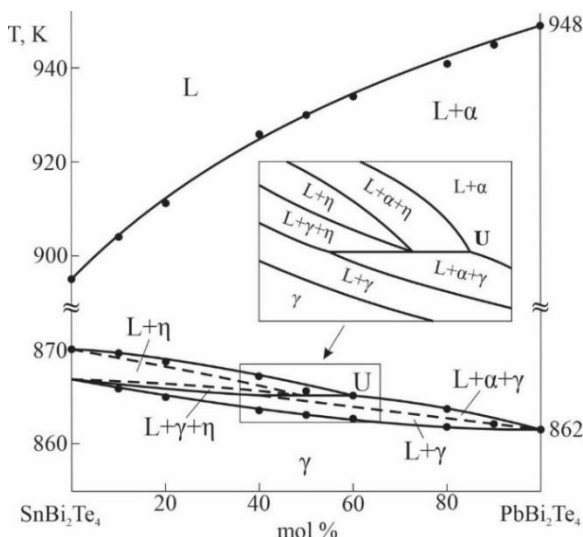
onlar əsasında bərk məhlulların bircinsli monokristallar halında alınmasının çox çətin olmasını məhz bununla izah etmək olar. Belə fazaların monokristallarını yetişdirmək üçün “ərinti-məhlulun” tərkibi çox dəqiq seçilməlidir.



Şəkil 10. SnTe-PbTe-Bi₂Te₃ sisteminin likvidus səthinin proyeksiyası.

Şəkil 11-də faza diaqramının SnBi₂Te₄-PbBi₂Te₄ politermik kəsiyi verilmişdir. Yuxarıda (şək.7 (a)) göstərdiyimiz kimi bu kəsik üzrə fasiləsiz əvəzolunma bərk məhlulları əmələ gəlir. Faza diaqramından göründüyü kimi baxılan politermik kəsik bütünlüklə α -bərk məhlulların ilkin kristallaşma sahəsində yerləşir. Ona görə də maye məhluldan ilkin olaraq α -faza kristallaşır. Bu proses $L+\alpha$ ikifazlı sahəsinin əmələ gəlməsinə gətirib çıxarır. Likvidusdan aşağıda kristallaşma mürəkkəb xarakter daşıyır. Şəkil 6 ilə müqayisə göstərir ki, təxminən 0-60 mol% PbBi₂Te₄ tərkib intervalında kristallaşma (4) peritektik reaksiyası, >60 mol% PbBi₂Te₄ sahəsində isə (7) peritektik reaksiyası ilə davam edir. Bu monovariant reaksiyaların gedişində sistemdə $L+\alpha+\eta$ və $L+\alpha+\gamma$ üçfazlı sahələri yaranır. Sonra baş verən kristallaşma prosesləri çox kiçik temperatur intervalını (870-862 K) əhatə edir və DTA ayrılırları əsasında onları xarakterizə edən termiki effektləri

aşkar etmək mümkün olmamışdır. Hətta çox kiçik miqdar (0,1 q) nümunələrin yavaş sürətlə (3-5 dərəcə/dəq) qızdırılması ilə alınan DTA əyriləri də bir yaygın pik şəklində olur.



Şəkil 11. Faza diaqramının SnBi_2Te_4 - PbBi_2Te_4 politermik kəsiyi

Bu fəsildə həmçinin SnBi_2Te_4 - PbBi_2Te_4 , SnBi_4Te_7 - PbBi_4Te_7 , $\text{SnBi}_6\text{Te}_{10}$ - $\text{PbBi}_6\text{Te}_{10}$ və qatılıq üçbucağının təpələrindən qarşı tərəflərə perpendikulyar xətlər üzrə SnTe - PbBi_2Te_4 , PbTe - SnBi_2Te_4 , Bi_2Te_3 - $\text{Sn}_{0,5}\text{Pb}_{0,5}\text{Te}$ politermik kəsikləri təqdim edilir.

Dördüncü fəsildə SnTe - PbTe - Bi_2Te_3 və PbTe - Bi_2Te_3 - Sb_2Te_3 sistemlərinin faza diaqramlarının 3D modelləşdirilməsinə həsr olunmuş işin nəticələri verilmişdir. İlkin olaraq fəslin əvvəlində faza tarazlıqlarının termodinamik əsasları və 3D modelləşdirilmənin əsas prinsipləri şərh edilmiş, sonra analitik metoddan istifadə etməklə SnTe - PbTe - Bi_2Te_3 və PbTe - Bi_2Te_3 - Sb_2Te_3 sistemlərində likvidus və solidus səthləri 3D modelləşdirilmişdir.

PbTe - Bi_2Te_3 - Sb_2Te_3 və SnTe - PbTe - Bi_2Te_3 sistemlərinin faza diaqramlarının multi 3D modelləşdirilməsi.

Üç komponentdən ibarət xalkogenid sistemlərin maye və bərk məhlullarının molyar Gibbs enerjisi onların sərhəd ikili sistemlərin

müvafiq termodinamiki funksiyaları əsasında hesablanı bilər:

$$\Delta \bar{G}_1^{iz.} = \frac{x_2}{x_2 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{1(12)}^{iz.} \right]_{x_1} + \frac{x_3}{x_2 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{1(13)}^{iz.} \right]_{x_1} + a_1 x_1 x_2 x_3 \quad (1)$$

$$\Delta \bar{G}_2^{iz.} = \frac{x_1}{x_1 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{2(12)}^{iz.} \right]_{x_2} + \frac{x_3}{x_1 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{2(13)}^{iz.} \right]_{x_2} + a_2 x_1 x_2 x_3 \quad (2)$$

$$\Delta \bar{G}_3^{iz.} = \frac{x_2}{x_2 + x_1} \left[\Delta \bar{G}_{3(12)}^{iz.} \right]_{x_3} + \frac{x_1}{x_2 + x_1} \left[\Delta \bar{G}_{3(13)}^{iz.} \right]_{x_3} + a_3 x_1 x_2 x_3 \quad (3)$$

Yuxarıdakı tənliklərdə $\Delta \bar{G}_{i(i,j)}^{iz.} - i$ komponentinin $i - j$ sərhəd sisteminə parsial izafi Gibbs enerjisidir. Sərhəd sistemlərinin izafi parsial molyar termodinamiki funksiyaları $x_i = \text{const}$ tərkibi üzrə toplanılır. a_i sabiti sistemin az sayda təcrübi kəmiyyətləri əsasında hesablanır. Tənliklərdə 3 komponentli sistemin sərhəd ikili sistemlərinin hamısının, yəni 1-2, 1-3, 2-3 sistemlərinin termodinamiki funksiyalarından istifadə edilə bilər:

$$\Delta \bar{G}^{iz.} = \frac{x_2}{x_2 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{1(12)}^{iz.} \right]_{x_1} + \frac{x_3}{x_2 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{1(13)}^{iz.} \right]_{x_1} - \\ - (1 - x_1)^2 \left[\Delta \bar{G}_{1(23)}^{iz.} \right] x_2 / x_3 + a_1 x_1 x_2 x_3 \quad (4)$$

(1-4) tənliklərində iki komponentli sistemlərin termodinamiki funksiyaları təcrübə yolu və ya 4.3.5 tipli tənliklərin köməyi ilə komponentlərin kristallaşma əyrilərinə əsasən hesablanır. 1-3 və 2-3 sistemlərinin ümumi komponenti olan 3 komponentinin parsial izafi Gibbs enerjisi üçün yazı bilərik:

$$\Delta \bar{G}_3^{iz.,m} = T \left(\Delta S_3^{ar.} - 19,144 \lg x_3 \right) - \Delta H_3^{ar.} \quad (5)$$

(1-3) tənliklərindəki termodinamiki funksiyaları (5) tənliyində yerinə yazsaq, 1-2-3 sisteminin komponentlərinin hamısının kristallaşma temperaturalarını hesablamaq üçün aşağıdakı tənliklər alınır:

$$T = \frac{\Delta H_1^{\text{ar.}} + \frac{x_2}{x_2 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{1(12)}^{\text{iz.}} \right]_{x_1} + \frac{x_3}{x_2 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{1(13)}^{\text{iz.}} \right]_{x_1} + a_1 x_1 x_2 x_3}{\Delta S_1^{\text{ar.}} - 8.31 \ln x_1} \quad (6)$$

$$T = \frac{\Delta H_2^{\text{ar.}} + \frac{x_1}{x_1 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{2(12)}^{\text{iz.}} \right]_{x_2} + \frac{x_3}{x_1 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{2(13)}^{\text{iz.}} \right]_{x_2} + a_2 x_1 x_2 x_3}{\Delta S_2^{\text{ar.}} - 8.31 \ln x_2} \quad (7)$$

$$T = \frac{\Delta H_3^{\text{ar.}} + \frac{x_2}{x_1 + x_2} \left[\Delta \bar{G}_{3(23)}^{\text{iz.}} \right]_{x_3} + \frac{x_1}{x_2 + x_1} \left[\Delta \bar{G}_{3(13)}^{\text{iz.}} \right]_{x_3} + a_3 x_1 x_2 x_3}{\Delta S_3^{\text{ar.}} - 8.31 \ln x_3} \quad (8)$$

(6-8) tənlikləri komponentin molyar ərimə entalpiyası ($\Delta H_i^{\text{ar.}}$) və entropiyasına ($\Delta S_i^{\text{ar.}}$) əsaslanır. Birləşmənin ərimə entropiya və ərimə entalpiyasının təcrübi qiymətləri olmadıqda, onların likvidusları bu birləşmələrin ilkin komponentlərindən molyar əmələgəlmə entalpiyası ($\Delta H_{i,T}^0$) və entropiyasının ($\Delta S_{i,T}^0$) qiymətlərinə əsaslanan (9-11) tənlikləri ilə hesablanmışdır:

$$T = \frac{\Delta H_1^0 + \frac{x_2}{x_2 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{1(12)}^{\text{iz.}} \right]_{x_1} + \frac{x_3}{x_2 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{1(13)}^{\text{iz.}} \right]_{x_1} + a_1 x_1 x_2 x_3}{\Delta S_1^0 - 8.31 \ln x_1} \quad (9)$$

$$T = \frac{\Delta H_2^0 + \frac{x_1}{x_1 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{2(12)}^{\text{iz.}} \right]_{x_2} + \frac{x_3}{x_1 + x_3} \left[\Delta \bar{G}_{2(13)}^{\text{iz.}} \right]_{x_2} + a_2 x_1 x_2 x_3}{\Delta S_2^0 - 8.31 \ln x_2} \quad (10)$$

$$T = \frac{\Delta H_3^0 + \frac{x_2}{x_1 + x_2} \left[\Delta \bar{G}_{3(23)}^{\text{iz.}} \right]_{x_3} + \frac{x_1}{x_2 + x_1} \left[\Delta \bar{G}_{3(13)}^{\text{iz.}} \right]_{x_3} + a_3 x_1 x_2 x_3}{\Delta S_3^0 - 8.31 \ln x_3} \quad (11)$$

Yuxarıdakı (6-11) tənlikləri üçün sistemin komponentinin və ya üçlü birləşmələrin bivariant tarazlığa aid ilkin kristallaşma səthini (likvidus səthi) ifadə edir. İki səthin kəsişmə əyrisi iki maddənin birgə kristallaşma prosesini ifadə edir. Bu xətlər monovariant tarazlıqların koordinatlarıdır. Likvidus ayrılmasının kəsişməsi ilə nonvariant tarazlıq nöqtəsi – üçlü evtektikanın tərkib və temperaturu təyin edilir.

Hal diaqramlarını yüksək ərimə temperaturuna malik sahələri termodinamiki üsulla hesablandıqdan sonra OriginLab kompüter proqramının analitik opsiyası vasitəsi ilə modelləşdirilmişdir. Likvidus səthlərinin görüntülənməsi üçün bəzi işlərdə müvəffəqiyyətli sınaqdan keçirilmiş analitik 3D modelləşmə üsulundan istifadə olunmuşdur.

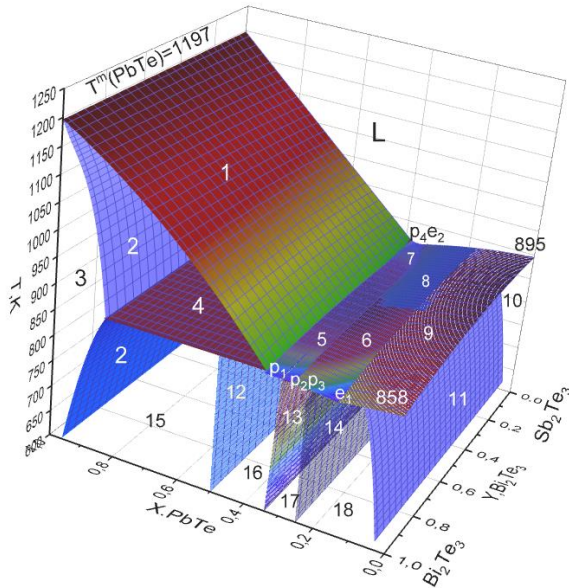
PbTe-Sb₂Te₃-Bi₂Te₃ sisteminin fazalarının 3D modelləşdirilməsinin analitik asılılıqları Cədvəl 2-də verilmişdir.

Cədvəl 2

Sb₂Te₃-PbTe-Bi₂Te₃ sistemində fazaların likvidus səthlərinin analitik ifadələri.

Şəkil 12-də səthlərin nömrəsi	$T, K=f(x, y);$ $x=x(\text{PbTe}); y= x(\text{Bi}_2\text{Te}_3)/[x(\text{Sb}_2\text{Te}_3)+ x(\text{Bi}_2\text{Te}_3)]; x_i-$ $\text{PbTe}, \text{Bi}_2\text{Te}_3, \text{Sb}_2\text{Te}_3$ birləşmələrinin molyar qatılıqlarıdır
1	$(1197-351*(1-x)-276.7*(1-x)^2-26.8*(1-x)^3)*y+(653+539*x+5.8*x^2)*(1-y)+70*y*(1-y)*(1-x)$ $x=0\div 0.625, y=0\div 1$
2	$(-268+1465*x+9728*(1-x)^2-91304*(1-x)^3)*y+(58828+113775*x-53750*x^2)*(1-y)$ $x=0.96\div 1, y=0\div 1;$ $(446+4325*x-10545*x^2)*(1-y)+(443,5+2065*x)*y,$ $x=0.832\div 0.954, y=0\div 1$
5	$694.5+593.7*(1-x)-518.5*(1-x)^2)*y+(765+250*x)*(1-y)+70*y*(1-y)*(1-x)$ $x=0.625\div 0.71, y=0\div 0.95$
6	$(776,4+264,5*x-215,4*x^2)*(1-y)+(596,6+677,5*x-437,5*x^2)*y,$ $x=0.695\div 0.875, y=0\div 1$
7	$(546+592*x-280*x^2)*(1-y)+(731+130*x)*y,$ $x=0.81\div 0.875, y=0\div 1$
9	$(629,6+421,9*(1-x)-190,5*(1-x)^2)*y+(895-46*x-180*x^2)*(1-y)+70*y*(1-y)*(1-x);$ $y=0\div 1$
11	$(-13642+34100*x-20000*x^2).$ $x=0.9\div 0.97, y=0\div 1$
12,13,14	$12550+26300*x; 9542-26300*x; -5975+26300*x$

PbTe-Bi₂Te₃-Sb₂Te₃ sisteminin hal diaqramının göstərilən fraqmentləri nömrələrinə müvafiq olaraq $T, K=f(x, y)$ tənliklər vasitəsilə şəkil 12-də görüntülənmişdir:



Şəkil 12. PbTe-Bi₂Te₃-Sb₂Te₃ sisteminin hal diaqramının PbTe-Bi₂Te₃ sistemi tərəfdən 3D görüntüsü.

- 1- $\alpha(\text{PbTe})$ əsasında bərk məhlulların likvidus səthi;
- 2- $\alpha(\text{PbTe})$ əsasında bərk məhlulların solidus səthi;
- 3- $\alpha(\text{PbTe})$ əsasında bərk məhlul sahəsi;
- 4- PbBi_2Te_4 peritektik birləşməsinin alındığı müstəvi;
- 5- PbBi_2Te_4 peritektik birləşməsinin likvidus səthi;
- 6- PbBi_4Te_7 və $\text{PbBi}_6\text{Te}_{10}$ peritektik birləşmələrinin likvidus səthi;
- 7- $\text{Pb}_2\text{Sb}_6\text{Te}_{11}$ peritektik birləşmələrinin likvidus səthi;
- 8- $\beta\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ əsasında bərk məhlulların likvidus səthi;
- 9- $\beta\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ və $\beta\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ əsasında bərk məhlulların likvidus səthi;
- 10- $\beta\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ və $\beta\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ əsasında bərk məhlul sahəsi;
- 11- $\beta\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ və $\beta\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ əsasında bərk məhlulların solidus səthi;
- 12-14: PbBi_2Te_4 , PbBi_4Te_7 , $\text{PbBi}_6\text{Te}_{10}$ fazalarının soliduslarının peritektik çevrilmələr müstəvilərinə şaquli olan müstəviləri;
- 15- $\alpha(\text{PbTe})$ əsasında bərk məhlullar+ PbBi_2Te_4 heterogen sahə;

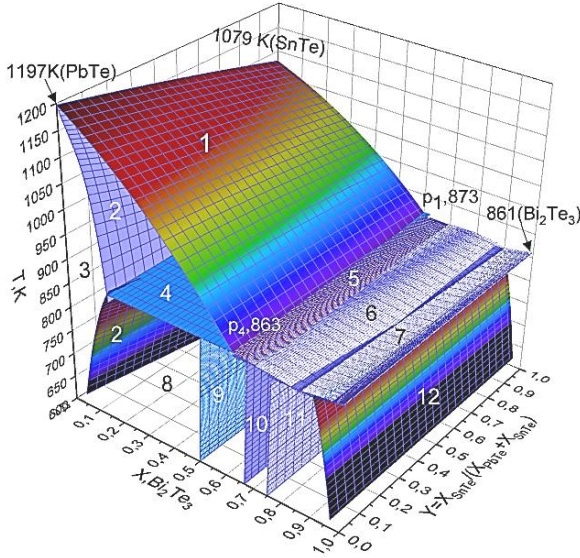
- 16- $\text{PbBi}_2\text{Te}_4 + \text{PbBi}_4\text{Te}_7$ heterogen sahə;
 17- $\alpha\text{-PbBi}_4\text{Te}_6 + \text{PbBi}_6\text{Te}_{11}$ heterogen sahə;
 18- $\beta\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ və $\beta\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ əsasında bərk məhlullar + $\text{PbBi}_6\text{Te}_{11}$ heterogen sahə.

Cədvəl 3

SnTe-PbTe-Bi₂Te₃ sistemində fazaların likvidus səthlərinin analitik ifadələri.

Şəkil 13-də səthlərin nömrəsi	$T, K=f(x, y);$ $x=x(\text{Bi}_2\text{Te}_3), y=x(\text{SnTe}/[x(\text{SnTe})+x(\text{PbTe})];$ $x_i=\text{SnTe, PbTe, Bi}_2\text{Te}_3$ birləşmələrinin mol payı
1	$-(1197-351*x-276,7*x^2-26,8*x^3)*(1-y)+(1079-211,33*x-189,7*x^2-102,1*x^3)*y+16*y*(1-y);$ $x=0\div 0.625, y=0\div 1$
2	$(1197-1465,3*x+9728*x^2-91304*x^3)*(1-y)+(1079-1923,1*x+5841,7*x^2-6624,48*x^3)*y-48*y*(1-y),$ $x=0\div 0.158, y=0\div 1; (446+4325*x-10545*x^2)*(1-y)+(443,5+2065*x)*y, x=0.046\div 0.168, y=0\div 1;$
5	$(760+374*x-308*x^2)*y+(694,5+593,7*x-518,5*x^2)*(1-y), x=0.625\div 0.71, y=0\div 0.95;$
6	$(776,4+264,5*x-215,4*x^2)*(1-y)+(596,6+677,5*x-437,5*x^2)*y, x=0.695\div 0.875, y=0\div 1;$
7	$(546+592*x-280*x^2)*(1-y)+(731+130*x)*y,$ $x=0.81\div 0.875, y=0\div 1$
9	$(-12550+26300*x), x=0.5\div 0.51, y=0\div 1$
10	$(-16942+26300*x), x=0.667\div 0.677, y=0\div 0.8;$
11	$(-19125+26300*x), x=0.75\div 0.759, y=0\div 1$
12	$(-13642+34100*x-20000*x^2), x=0.9\div 0.97, y=0\div 1$

SnTe-PbTe-Bi₂Te₃ sisteminin fazalarının 3D modelləşdirilməsinin analitik asılılıqları Cədvəl 3-də verilmişdir. Bu tənliklər faza səthlərini ayrıca və bütün fazaları bir qrafikdə vizuallaşdırmağa imkan verir (Şəkil 13).



Şəkil 13. SnTe-PbTe-Bi₂Te₃ sisteminin hal diaqramının PbTe-Bi₂Te₃ sistemi tərəfdən 3D görüntüsü.

- 1- $\alpha(\text{PbTe})$ və $\alpha(\text{SnTe})$ əsasında bərk məhlulların likvidus səthi;
- 2- $\alpha(\text{PbTe})$ və $\alpha(\text{SnTe})$ əsasında bərk məhlulların solidus səthi;
- 3- $\alpha(\text{PbTe})$ və $\alpha(\text{SnTe})$ əsasında bərk məhlul sahəsi;
- 4- PbBi_2Te_4 və SnBi_2Te_4 peritektik birləşmələrinin alındığı müstəvi;

5- $p_1p_2p_4p_5$ (bax şəkil: üçlü sistemin proyeksiyası) sahəsi üzrə peritektik birləşmələrin kristallaşma səthi;

6- $p_2p_5p_4p_6e_1e_2$ sahəsi üzrə peritektik birləşmələrin kristallaşma səthi

7- $\beta\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ əsasında bərk məhlulların likvidus səthi;

8- PbBi_2Te_4 , SnBi_2Te_4 birləşmələri və $\alpha(\text{PbTe})$, $\alpha(\text{SnTe})$ əsasında bərk məhlulların heterogen qarışığı;

9-11: $\text{Pb}(\text{Sn})\text{Bi}_2\text{Te}_4$, $\text{Pb}(\text{Sn})\text{Bi}_4\text{Te}_7$, $\text{Pb}(\text{Sn})\text{Bi}_6\text{Te}_{10}$ fazalarının soliduslarının peritektik çevrilmələr müstəvilərinə şaquli olan müstəviləri;

12- $\beta\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ əsasında bərk məhlulların solidus səthi.

Beləliklə, baxılan hər iki kvaziüçlü sistemin faza diaqramının

3D modelləşdirilməsi və termodinamik analizi təcrübi nəticələrlə yaxşı uyğun gəlir və göstərir ki, qurğuşun-bismut telluridlərinin quruluş analoqları olan üçlü birləşmələrdən təşkil olunmuş mürəkkəb sistemlər termodinamik cəhətdən stabil olan fasiləsiz bərk məhlul sahəsinin əmələ gəlməsi ilə səciyyələnir. Aparılmış termodinamik analiz həmçinin göstərir ki, bu sistemlərdə əmələ gələn maye və bərk məhlullar assosiasiya olunmuş requlyar məhlul hesab edilə bilər.

NƏTİCƏLƏR

1. DTA, DSK, RFA və SEM üsulları ilə müvafiq dördkomponentli sistemlərin $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ qatılıq müstəviləri üzrə komponentlərin fiziki-kimyəvi qarşılıqlı təsir xarakteri müəyyən edilmişdir. Hər iki qatılıq üçbucağında fazaların ərintidən ilkin kristallaşma sahələri, faza tarazlıqlarını əks etdirən non- və monovariant proseslərin tipləri müəyyən edilmişdir. Göstərilmişdir ki, hər iki qatılıq müstəvisi müstəqil kvaziüçlü sistemlər olub, topoloji izolyator xassəli üçlü və binar birləşmələr əsasında geniş bərk məhlul sahələrinin əmələ gəlməsilə səciyyələnir [1, 8, 9, 13].
2. $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ sistemində likvidus səthi ilkin binar birləşmələr və PbBi_2Te_4 , PbBi_4Te_7 və $\text{PbBi}_6\text{Te}_{10}$ üçlü birləşmələri əsasında bərk məhlulların ilkin kristallaşmasını əks etdirən 6 sahədən ibarətdir. Bu səthlər bir-biri ilə bir sıra monovariant peritektik və evtektik tarazlıq ayrılıqları və nonvariant peritektik, keçid və evtektik tarazlıq nöqtələri ilə sərhədlənilirlər. Sistemdə PbBi_2Te_4 , PbBi_4Te_7 və $\text{PbBi}_6\text{Te}_{10}$ üçlü birləşmələri əsasında $\text{Bi} \rightarrow \text{Sb}$ əvəzləməli geniş bərk məhlul sahələri aşkar edilmişdir. Həmçinin göstərilmişdir ki, $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ sərhəd sistemində mövcud olan fasiləsiz bərk məhlul sırası qatılıq üçbucağı daxilinə nüfuz edərək ~3-8 mol% enində homogenlik zolağı yaradır [1, 2, 3, 9, 10].
3. $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ kvaziüçlü sistemində də likvidus 6 fazanın ilkin kristallaşma sahəsindən ibarətdir. Sistemdə $\text{SnBi}_2\text{Te}_4\text{-PbBi}_2\text{Te}_4$, $\text{SnBi}_4\text{Te}_7\text{-PbBi}_4\text{Te}_7$ və $\text{SnBi}_6\text{Te}_{10}\text{-PbBi}_6\text{Te}_{10}$ kəsikləri üzrə fasiləsiz bərk məhlul sıraları, Bi_2Te_3 , $\text{Sn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ və $\text{Sn}_3\text{Bi}_2\text{Te}_6$ birləşmələri əsasında isə geniş homogenlik sahələri aşkar olunmuşdur.

- Göstərilmişdir ki, SnTe-PbTe sərhəd sisteminin bərk məhlulları üçlü sistem daxilinə 10 mol%-ə qədər nüfuz edir. Sistemin xarakterik cəhəti odur ki, $\text{SnTe-Bi}_2\text{Te}_3$ və $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ yan tərəflərində monovarinat tarazlıq nöqtələrinin əksəriyyəti bir-biri ilə monovarinat tarazlıq ayrıləri ilə əlaqədəirlər. Bu, yuxarıda qeyd edilən fasiləsiz bərk məhlul sıralarının mövcud olması ilə əlaqədardır [6, 7, 8, 13].
4. Müəyyən edilmişdir ki, hər iki kvaziüçlü sistemdə üçlü birləşmələr əsasında dəyişən tərkibli fazaların ilkin kristallaşması, həmçinin non- və monovarinat tarazlıqlar bu sistemlərin ümumi T-x-y diaqramlarında çox kiçik temperatur intervallarını və qatılıq sahələrini əhatə edir. Bu, həmin fazaların laylı (o cümlədən, qarışıq laylı) quruluşa malik olub, bir-birinə keçən peritektik reaksiyalar seriyası üzrə parçalanmaqla ərimələri ilə əlaqədardır və ionların homogen halda alınmasını çətinləşdirən faktordur [1, 8, 9, 13].
 5. Tədqiq edilən sistemlərdə aşkar olunmuş $\text{Sb} \rightarrow \text{Bi}$ və $\text{Sn} \rightarrow \text{Pb}$ əvəzləməli müxtəlif tərkibli bərk məhlullar fərdi şəkildə alınmış və identifikasiya olunmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, onlar tetradiomitəbənzər quruluşa malik Van der Vaals fazaları olub, potensial topoloji izolyator materiallarıdır. Bərk məhlulların kristal qəfəs parametrləri hesablanmış və onların tərkibdən asılılığının Veqard qaydasını ödəməsi göstərilmişdir [1, 8, 9, 13].
 6. Faza tarazlıqlarının termodinamik kriteriyalarına və qeyri-səlis məntiq yanaşmasının prinsiplərinə əsaslanmaqla $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ - Sb_2Te_3 və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ kvaziüçlü sistemlərində və onların kvazibinar sərhəd sistemlərində PbTe , SnTe , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , PbBi_2Te_4 , PbBi_4Te_7 və $\text{PbBi}_6\text{Te}_{10}$ birləşmələri əsasında bərk məhlulların likvidus və solidus səthləri (əyriləri) dəqiqləşdirilmişdir. Bərk məhlulların həddlərini təyin etmək üçün qeyri-səlis məntiq yanaşmasına əsaslanan fiziki-kimyəvi modelin effektivliyi göstərilmişdir [4, 5, 11, 12, 14, 15].
 7. $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ və $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemlərinin T-x-y diaqramlarında bütün binar və üçlü birləşmələr əsasında bərk məhlulların, o cümlədən, peritektik reaksiya üzrə əmələ gələn fazaların kristallaşmasının temperatur və tərkibdən asılılığını əks etdirən analitik ifadələr alınmış, onlardan istifadə etməklə həcmi faza

diqramlarında likvidus və solidus səthlərinin Multi 3D modelləri işlənmiş və qrafiki görüntülənmişdir [4, 5, 11, 12, 14, 15].

DISSERTASIYA İŞİNİN ƏSAS NƏTİCƏLƏRİ AŞAĞIDAKI ELMİ ƏSƏRLƏRDƏ ƏKS OLUNMUŞDUR:

1. Aghazade, A.I. Phase equilibria of the PbBi_2Te_4 – “ PbSb_2Te_4 ” section of the PbTe - Bi_2Te_3 - Sb_2Te_3 system and some properties of the solid solutions // Azerbaijan Chemical Journal, -2020. №4, -p.53-59.
2. Aghazade, A.I., Orujlu, E.N., Gasymov, V.A., Babanly, M.B. Solid-phase equilibria in the PbTe - Bi_2Te_3 - Sb_2Te_3 system // 9th Rostocker International Conference: “Thermophysical Properties for Technical Thermodynamics”, -Rostock, -Germany, -2020, -p.55.
3. Aghazade, A.I., Oruculu, E.N., Babanlı, M.B. PbTe - Bi_2Te_3 - Sb_2Te_3 sistemində PbBi_4Te_7 əsasında bərk məhlullar // “Müasir təbiət və iqtisad elmlərinin aktual problemləri” beynəlxalq elmi konfrans, - Gəncə, - Azərbaycan, - 2021, - p.28-31.
4. Aghazade, A.I., Mammadov, A.N., Babanly, M.B. Study and modeling of the phase diagram of the system Bi_2Te_3 - SnTe - PbTe in the region of solid solutions based on SnTe , PbTe and peritectic phases SnBi_2Te_4 , PbBi_2Te_4 // 10th Rostocker International Conference: “Thermophysical Properties for Technical Thermodynamics”, - Rostock, - Germany, - 2021, - p.7.
5. Aghazade, A.I., Mammadov, A.N., Babanly, M.B. Thermodynamic calculation and modeling of the phase diagram of the PbTe - Bi_2Te_3 - Sb_2Te_3 // “1st International congress on natural sciences”, (ICNAS)-Erzurum, - Turkey, - 2021, - p.117.
6. Aghazade, A.I., Orujlu, E.N., Babanly, M.B. Experimental investigation of solid-phase equilibria in the SnTe - PbTe - Bi_2Te_3 system // XI Международная научная конференция "Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация и материалы нового поколения", -Иваново, -Россия, -2021, -p.229-230.
7. Aghazade, A.I., Orujlu, E.N., Sultanova, S.G., Babanly, M.B. Solid solutions in the SnBi_2Te_4 - PbBi_2Te_4 system // “Физико-химические процессы в конденсированных средах и на межфазных границах”, -Воронеж, -2022, -p.164-165.

8. Aghazade, A.I. Phase relations and characterization of solid solutions in the $\text{SnBi}_2\text{Te}_4\text{-PbBi}_2\text{Te}_4$ and $\text{SnBi}_4\text{Te}_7\text{-PbBi}_4\text{Te}_7$ systems // *Azerbaijan Chemical Journal*, -2022. №3, - p.75-80.
9. Aghazade, A.I. New topological insulator phases of variable composition in the $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ system / A.I.Aghazade, E.N.Orujlu, S.Z. Imamaliyeva [et al.] // *Properties and uses of antimony*, Nova publishers, – 2022. – p.96–112.
10. Aghazade, A.I., Oruculu, E.N., Babanlı, M.B. $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ sisteminin likvidus səthi // “Müasir təbiət və iqtisad elmlərinin aktual problemləri” beynəlxalq elmi konfrans, - Gəncə, - Azərbaycan, - 2022, -s.12-15.
11. Aghazade, A.I., Mammadov, A.N., Babanlı, M.B. Thermodynamic calculation of boundaries of solid solutions in systems $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ and $\text{PbTe-SnTe-Bi}_2\text{Te}_3$ // XXIII International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia, - Kazan, - Russia, - 2022, - p.160.
12. Aghazade, A.I. 3D modeling of phase diagram of the ternary $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ system / A.I.Aghazade, V.I.Babanly, I.M.Gojayeva [et al.] // *Azerbaijan Chemical Journal*, -2023. №2, -p.62-68.
13. Aghazade, A.I. Experimental investigation of the solid phase equilibria at 300 K in the $\text{SnBi}_2\text{Te}_4\text{-PbBi}_2\text{Te}_4\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ system / A.I.Aghazade, E.N.Orujlu, Z.E.Salimov [et al.] // *Physics and Chemistry of Solid State*, – 2023. №3, – p. 453–459.
14. Aghazade, A.I. Multi-3D modeling of phase diagram of $\text{PbTe-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ system / A.I.Aghazade, S.M.Rustamova, I.M.Gojayeva [et al.] // *Chemical Problems*, -2023. №4, -p.353-360.
15. Aghazade, A.I., Oruculu, E.N., Məmmədov, A.N., Babanlı, M.B. $\text{SnTe-PbTe-Bi}_2\text{Te}_3$ sistemində qalay və qurğuşun telluridləri əsasında bərk məhlulların kristallaşma səthlərinin təyini və analitik 3D modelləşdirilməsi // “Müasir təbiət və iqtisad elmlərinin aktual problemləri” beynəlxalq elmi konfrans, - Gəncə, - Azərbaycan, -2023, - p.18-20.

Dissertasiyanın müdafiəsi _____ 2025-ci il tarixində saat _____ Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyinin Bakı Dövlət Universitetinin nəzdində fəaliyyət göstərən ED 2.16 Dissertasiya Şurasının iclasında keçiriləcək.

Ünvan: AZ 1148, Bakı şəhəri, akademik Zəhid Xəlilov küçəsi, 33, Bakı Dövlət Universiteti, əsas bina

Dissertasiya ilə Bakı Dövlət Universitetinin kitabxanasında tanış olmaq mümkündür.

Dissertasiya və avtoreferatın elektron versiyaları Bakı Dövlət Universitetinin rəsmi internet saytında yerləşdirilmişdir.

Avtoreferat _____ 2025-ci il tarixində zəruri ünvanlara göndərilmişdir.

Çapa imzalanıb: 14.03.2025

Kağızın formatı: 60x84^{1/16}

Həcm: 37698

Tiraj: 100 nüsxə