



**AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA
ELMİN İNKİŞAFI FONDU**

**Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında
Elmin İnkişafı Fondu ilə
Belarus Respublika Fundamental Tədqiqatlar Fondunun
birgə elmi-tədqiqat layihələrinin və proqramlarının
maliyyələşdirilməsi məqsədi ilə qrantların verilməsi üzrə
1-ci Azərbaycan-Belarus beynəlxalq müsabiqəsinin
(EİF-BGM-2-BRFTF-1-2013) qalibi olmuş layihənin
yerinə yetirilməsi üzrə**

YEKUN ELMİ-TEXNİKİ HESABAT

Layihənin adı: **3d keçid elementləri ilə aşqarlanmış defekt quruluşlu ZnO və ZnSnAs₂ birləşmələrinin struktur, elektron və maqnit xassələrinin təməl prinsiplərdən tədqiqi**

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: **Orucov Hüseyn Surxay oğlu**

Qrantın məbləği: **60 000 manat**

Layihənin nömrəsi: **EİF-BGM-2-BRFTF-1-2013-07/03/1-M-05**

Müqavilənin imzalanma tarixi: **26.08.2013**

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: **24 ay**

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): **01.09.2013 - 01.09.2015**

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

Diqqət! Uyğun məlumat olmadığı təqdirdə müvafiq bölmə boş buraxılır

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

1 Layihənin həyata keçirilməsi üzrə yerinə yetirilmiş işlər, istifadə olunmuş üsul və yanaşmalar

Layihə çərçivəsində ZnO və ZnSnAs₂ birləşmələrində 3d-elementləri Mn, Co, Fe, Ni, Cr, V ilə aşqarlamaqla və vakansiyalar yaratmaqla alınan strukturların elektron və maqnit xassələri kvant-mexaniki modeləşdirmə və simulyasiya yerinə yetirilməklə təməl prinsiplərdən tədqiq edilmişdir. Nəzəri tədqiqatlar Danimarkanın lisenziyalı Quantum Wise Atomostix Toolkit proqramlar paketi istifadə olunmaqla həyata keçirilmişdir. Hesablamalar Hubbard_U düzəlişləri nəzərə alınmaqla Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsinin (DFT - Density Functional Theory) LSDA (Local Spin Density Approximation) və SGGA (Spin Generalized Gradient Approximation) yaxınlaşmaları çərçivəsində yerinə yetirilmişdir. Maqnit momentinin hesablanması Mulliken population analysis

tətbiq olunmaqla yerinə yetirilmişdir. Kristal quruluşda ferromağnit və antiferromağnit spin düzülüşləri əldə etmək üçün elektron spin halları nəzərə alınmışdır. Düzbucaqlı paraleliped şəklində 32, 48, 64, 96, 128, 192 və 256 atomluq ZnSnAs₂:Me və ZnO:Me (burada Me 3d-keçid elementləridir: Mn, Fe, Co, Ni, Cr, V) geniş özəkləri seçilməklə optimal strukturlar müəyyən edilərək onların elektron zona quruluşu, tam enerjisi, elektron hallar sıxlığı və mağnit (ferromağnit, antiferromağnit) xassələrinin nəzəri tədqiqatları yerinə yetirilmişdir.

Xalkopirit quruluşda antiferromağnit xassəli MnSnAs₂ yarımkəçirici materialın mövcud ola biləcəyi proqnozlaşdırılaraq, yeni birləşmənin qəfəs, struktur və mağnit parametrləri hesablanmışdır.

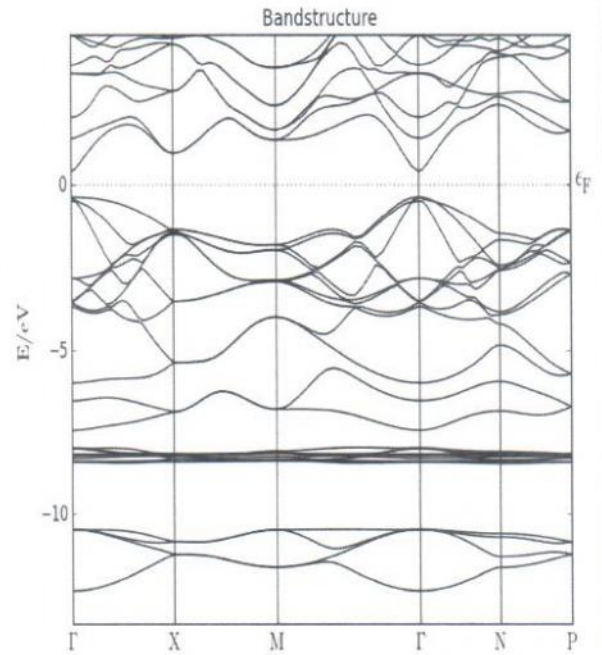
2 Layihənin həyata keçirilməsi üzrə planda nəzərdə tutulmuş işlərin yerinə yetirilmə dərəcəsi (faizlə qiymətləndirməli)

Layihədə ZnSnAs₂ və ZnO birləşmələri üçün planda nəzərdə tutulmuş işlərin ~90 %-i yerinə yetirilmişdir.

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

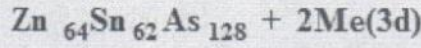
Hubbard_U parametrləri seçilməklə ZnSnAs₂ birləşməsinin elektron zona quruluşu hesablanmışdır (Şək.1). Hesablamaların nəticələrinə əsasən ZnSnAs₂ birləşməsi qadağan zolağının eni 0.76 eV olan qeyri-mağnit yarımkəçirici materialdır (spin_up və spin_down halların zonaları üst-üstə düşür). Valent zonasının tavanı Brillouin zonasının mərkəzində yerləşir və üçqat cırlaşmış haldadır. Spin-orbital qarşılıqlı təsirin nəzərə alınması cırlaşmanı qismən aradan qaldırır. Keçirici zonanın dibi də Brillouin zonasının mərkəzində yerləşməklə materialın düzzolaqlı olmasını təmin edir və fundamental udma oblastının kənarının düz keçidlərlə formalaşmasını şərtləndirir. Qeyd edək ki, materialın düzzolaqlı olması onun həm də optoelektronikada istifadəsini mümkün edir. DOS hesablamalarına əsasən Zn-3d hallarından törəyən zonalar valent zonasının tavanından 7.5-8.0 eV aşağıda yerləşməklə materialın elektrik xassələrində az da olsa önəm daşımır. Bu zonalar dar zolaq şəklində (~0.5 eV enində) əsas qrup valent zonalardan bir qədər aşağıda yerləşirlər. Optik xassələrə gəlincə Zn-3d zonalardan baş verən optik keçidlər 8.3 eV və daha böyük enerjili fotonların iştirakı ilə baş verə bilər. As-5s hallarından törəyən zonalar valent zonasının tavanından 10--12 eV aşağıda yerləşmişlər. Valent zonasının (0 - -3eV) enerji aralığında yerləşən ən yuxarı hissəsi əsasən As atomlarının p-hallarından törəyir. Bu zonalarla Zn-3d hallarından törəyən zonalar arasında qalan hissədə Zn və Sn s-hallarından törəyən zonalar yarımizolə olunmuş halda yerləşmişlər. Brillouin zonasının XM simmetrik xətti üzrə zonaların ikiqat cırlaşması baş verir.

Aşağıdakı cədvəldə 3d-element atomlarının Sn və Zn atomlarının əvəzedicisi kimi iştirak etdiyi hallarda 256 atomluq supercell ilə ferromağnit (FM) və antiferromağnit (AFM) spin düzülüşləri



Şək 1. ZnSnAs₂ zona quruluşu

hallarında alınmış qadağan zolağın eninin dəyişməsinə aid tədqiqatların nəticələri əks olunmuşdur. Cədvəldə E_V , E_C – müvafiq olaraq valent zonanın tavanının və keçirici zonanın dibinin enerjiləri, E_g ilə qadağan zolağın eninin enerjisi işarə olunmuşdur.



Band gaps (eV)

ZnSnAs ₂	AFM			FM		
	E_g	E_c	E_v	E_g	E_c	E_v
2Co(Sn)	0.750	0.942	0.192	0.692	0.922	0.230
2Co(Zn)	0.801	0.298	-0.503	0.764	0.299	-0.465
2Cr(Sn)	0.889	0.497	-0.372	0.808	0.489	-0.319
2Cr(Zn)	0.707	0.455	-0.152	0.787	0.445	-0.342
2Fe(Sn)	0.697	0.916	0.219	0.676	0.911	0.235
2Fe(Zn)	0.787	0.330	-0.457	0.751	0.323	-0.428
2Mn(Sn)	0.737	0.149	-0.588	0.750	0.185	-0.565
2Mn(Zn)	0.775	0.621	-0.154	0.738	0.588	-0.150
2Ni(Sn)	0.895	1.110	0.215	0.689	0.962	0.273
2Ni(Zn)	0.737	0.546	-0.191	0.762	0.482	-0.280
2V(Sn)	0.855	0.419	-0.436	0.836	0.438	-0.398
2V(Zn)	0.832	1.164	0.332	0.813	1.125	0.312

For perfect $\text{Zn}_{64}\text{Sn}_{64}\text{As}_{128}$ supercell
 $E_g=0.764$ eV ($E_c=0.1295$ eV, $E_v=-0.635$ eV)

Təməl prinsiplərdən DFT nəzəriyyəsi çərçivəsində yerinə yetirilən hesablamalar və Mulliken Population Analysis ilə müəyyən edilmişdir ki, xalkopirit quruluşda ZnSnAs_2 birləşməsi tərkibdə Sn atomlarının Mn aşqarları ilə əvəzlənməsi halında maqnit Mn ionlarının spin-ferromaqnit düzülüş əldə etməsi ilə güclü maqnit xassələri qazanır (Şək. 2). Tərkibdə Zn atomlarının Mn aşqarları ilə əvəzlənməsi halında isə Mn ionlarının spin-antiferromaqnit düzülüş əldə etməsile birləşmə zəif maqnit materiala çevrilir. Tam enerji hesablamalarından Mn(Sn) əvəzlənməsinin Mn(Zn) əvəzlənməsi ilə müqayisədə energetik cəhətdən əlverişli olmaqla daha böyük ehtimalla baş verdiyi sübuta yetirilmişdir.

$\text{ZnSnAs}_2:\text{Mn}$ strukturunda defektlərin mövcudluğu materialın maqnit xassələrinin dəyişməsinə gətirir. Aşağıda 96 atomluq geniş özəkdə 1 ədəd Mn(Sn) əvəzlənməsi və bununla yanaşı həm də vakansiyaların ($\text{vac}(\text{Sn})$, $\text{vac}(\text{Zn})$ və $\text{vac}(\text{As})$) mövcud olduğu hallarda alınmış nəticələri gətirik.

1. 96 atomluq superözəkdə Mn(Sn) əvəzlənməsi + $\text{vac}(\text{Sn})$:

- 1) Mn(Sn) əvəzlənməsi halında Mn atomu $4.8\mu_B$ maqnit momenti yaradır (burada μ_B Bor maqnetonudur). Digər atomlar da maqnitlənmədə az və ya çox dərəcədə iştirak edirlər. Burada əsas pay Mn ilə rabitədə olan və vakansiya hesabına qırılmış rabitəsi olan As atomlarına aiddir. As atomlarının maqnitlənməsi əsasən onların p-orbitalları hesabına baş verir.
- 2) Mn atomu ilə rabitədə olan As atomları sahəni zəiflədir (hər atom təxminən $-0.2\mu_B$).
- 3) Mn ilə rabitədə olan həm də $\text{vac}(\text{Sn})$ hesabına qırılmış rabitəyə malik As atomu sahəni daha güclü zəiflədir (zəifləmə təxminən $-0.7\mu_B$).
- 4) Sn vakansiyası ətrafında olan 4 ədəd As atomları sahəni gücləndirirlər! (hər atom təxminən $0.12\mu_B$).

- 5) 96 atomluq superözəkdə Mn(Sn) əvəzetməsi +vac(Sn) hesabına yekun manit momenti $\sim 3.4 - 3.8\mu_B$ təşkil edir.
- 6) Vakansiyasız Mn(Sn) halı ilə müqayisədə 1 ədəd vac(Sn) hesabına superözəyin maqnit momenti, vakansiya ilə Mn atomunun qarşılıqlı yerləşməsindən asılı olaraq, $\sim 0.3-0.7\mu_B$ artım əldə edə bilər.

2. 96 atomluq superözəkdə Mn(Sn) əvəzetməsi +vac(Zn):

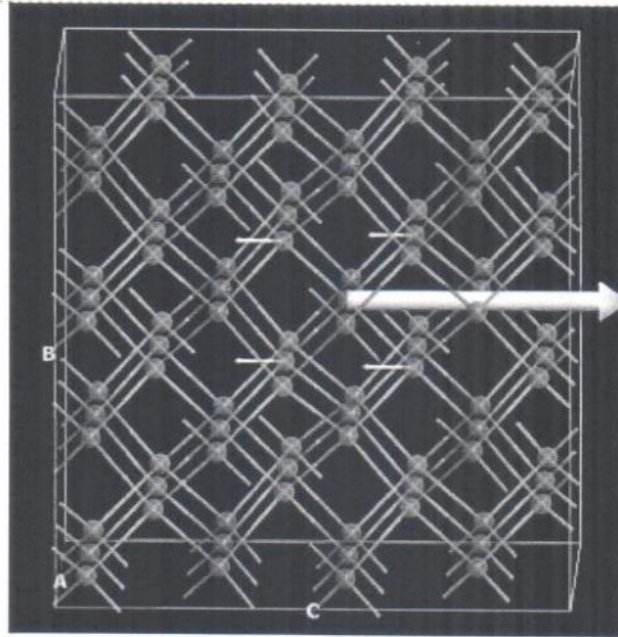
- 1) Mn(Sn) $4.8\mu_B$ maqnit momenti yaradır. Digər atomlar da maqnitlənmədə az və ya çox dərəcədə iştirak edirlər. Burada əsas pay Mn ilə rabitədə olan və vakansiya hesabına qırılmış rabitəsi olan As atomlarına aiddir. As atomlarının maqnitlənməsi əsasən onların p-orbitalları hesabınadır.
- 2) Tək Mn atomu ilə rabitədə olan As atomları sahəni zəiflədirlər (hər atom təxminən $0.2\mu_B$).
- 3) Mn ilə rabitədə olan həm də vac(Zn) hesabına qırılmış rabitəsi olan As atomu sahəni daha güclü zəiflədir (təxminən $-0.5\mu_B$).
- 4) Zn vakansiyası ətrafında olan 4 ədəd As atomları, qırılmış rabitəli atom istisna olmaqla, sahəni əsasən gücləndirirlər (hər biri təxminən $0.02\mu_B$).
- 5) 96 atomluq superözəkdə Mn(Sn)+vac(Zn) hesabına yekun manit momenti $\sim 3.0-3.5\mu_B$.
- 6) Vakansiyasız Mn(Zn) halı ilə müqayisədə 1 ədəd vac(Zn) hesabına superözəyin maqnit momenti $\sim 0.5\mu_B$ artım əldə edə bilər.

3. 96 atomluq superözəkdə Mn(Sn) əvəzetməsi + vac(As) hesabına nəticələr:

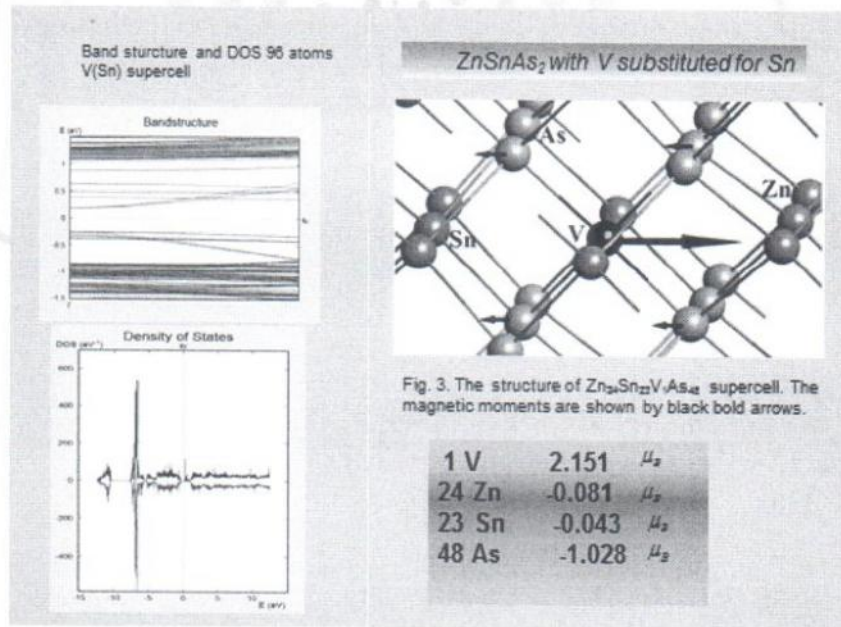
- 1) Mn(Sn) əvəzetməsi halında Mn atomu $4.8\mu_B$ maqnit momenti yaradır və bu zaman digər atomlar da maqnitlənmədə iştirak edirlər.
- 2) Mn atomu ilə rabitədə olan 4 ədəd As atomları sahəni zəiflədirlər (1 As atomu təxminən $-0.15\mu_B$. Bu zəifləmə Mn(Sn) əvəzetməsi halı ilə müqayisədə kiçikdir.)
- 3) As vakansiyası ətrafında olan atomlar (2 ədəd Zn və 2 ədəd Sn) sahəni cüzi gücləndirirlər (1 atoma təxminən $0.01\mu_B$)!
- 4) 96 atomluq supercell-də Mn(Sn)+vac(As) hesabına yekun manit momenti $\sim 4\mu_B$.
- 5) Vakansiyasız Mn(Sn) halı ilə müqayisədə 1 ədəd vac(As) hesabına superözəyin maqnit momenti $\sim 1\mu_B$ artım əldə edir.
- 6) Struktur dəyişmələrinə gəlincə, relax halında vac(As) ətrafında qırılmış rabitəyə malik 4 atomdan 2 ədəd Sn atomu vakant yerə yaxınlaşmış, 2 ədəd Zn atomu əksinə vakant yerdən uzaqlaşmış vəziyyətdədirlər. Bu yaxınlaşma (uzaqlaşma) vakansiya olmayan haldakı atomlararası məsafənin 0.2-dən böyük deyildir.

ZnSnAs₂ birləşməsi tərkibdə Sn və Zn atomlarının V aşqarları ilə əvəzlənməsi hallarında maqnit V ionlarının spin-ferromaqnit düzülüş əldə etməsi ilə güclü maqnit xassələri qazanır. Tam enerji hesablamalarının nəticələrinə əsasən müəyyən edilmişdir ki, V(Sn) əvəzetməsi V(Zn) ilə müqayisədə energetik cəhətdən daha əlverişlidir. Strukturda vakansiyaların mövcudluğu və onun yeri maqnit xassələrinin dəyişməsinə gətirir. Belə ki, Zn vakansiya dopant V atoma yaxın yerləşdikdə, vakansiya hesabına dopant atomun yaxın ətrafındakı As atomlarından birinin rabitəsi qırılır, özəyin maqnit momenti $\sim 0.3\mu_B$ artıb $\sim 3.3\mu_B$, uzaqda yerləşdiyi halda isə $\sim 0.3\mu_B$ azalıb $\sim 2.7\mu_B$ olur.

V(Sn) əvəzetməsi halında V atomu $2.151\mu_B$ maqnit momenti qazanır (Şək.3). 24 ədəd Zn atomları maqnitlənməni $0.081\mu_B$, 23 ədəd Sn atomları $0.043\mu_B$, 48 ədəd As atomları isə daha böyük olmaqla $1.028\mu_B$ zəiflədirlər. Sonuncu halda əsas pay yene də dopant V atomu ilə kimyəvi rabitədə olan 4 ədəd As atomuna düşür. Yekun maqnit momenti $1\mu_B$.

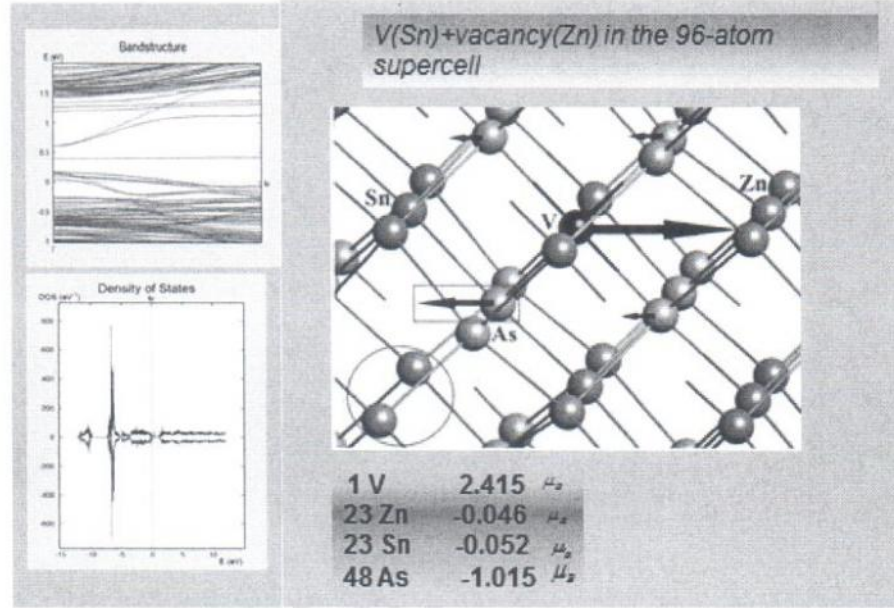


Şək.2 96 atomluq geniş özəkdə 1 ədəd Mn(Sn) əvəzəməsi ilə meydana gələn maqnitləşmə. Zn atomları göy, Sn atomları yaşıl, As atomları isə çəhrayı rəngdə dairelərlə təsvir edilmişdir. Kimyəvi rabitədə olan yaxın atomlar qollarla birləşdirilmişdir



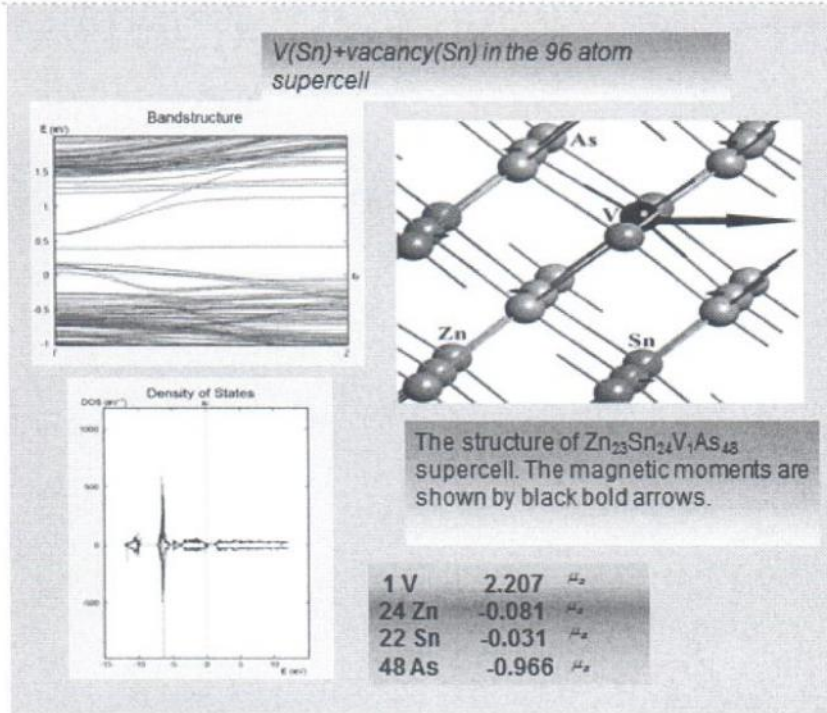
Şək.3. 96 atomluq geniş özəkdə 1 ədəd V(Sn) əvəzəməsi halında elektron zona quruluşu, DOS, meydana gələn maqnitləşmə və maqnitləşmədə atomların iştirak payı. (Zn atomları göy, Sn atomları yaşıl, As atomları isə çəhrayı rəngdə dairelərlə təsvir edilmişdir. Kimyəvi rabitədə olan yaxın atomlar biri-biri ilə qollarla birləşdirilmişdir).

V(Sn) əvəzətməsi+vacancy (Zn) halında (Şək.4) V atomu $2.415 \mu_B$ maqnit momenti qazanır. 23 ədəd Zn atomları maqnitlənməni $0.046 \mu_B$, 23 ədəd Sn atomları $0.052 \mu_B$, 48 ədəd As atomları isə daha böyük olmaqla $1.015 \mu_B$ zəiflədirlər. Sonuncu halda əsas pay yenə də dopant V atomu ilə kimyəvi rabitədə olan 4 ədəd As atomuna düşür. Yekun maqnit momenti $1.302 \mu_B$ V(Sn) əvəzətməsi. Yəni, Zn vakansiyası hesabına V(Sn) əvəzətməsi ilə yaranmış maqnit momenti $\sim 0.3 \mu_B$ artır.

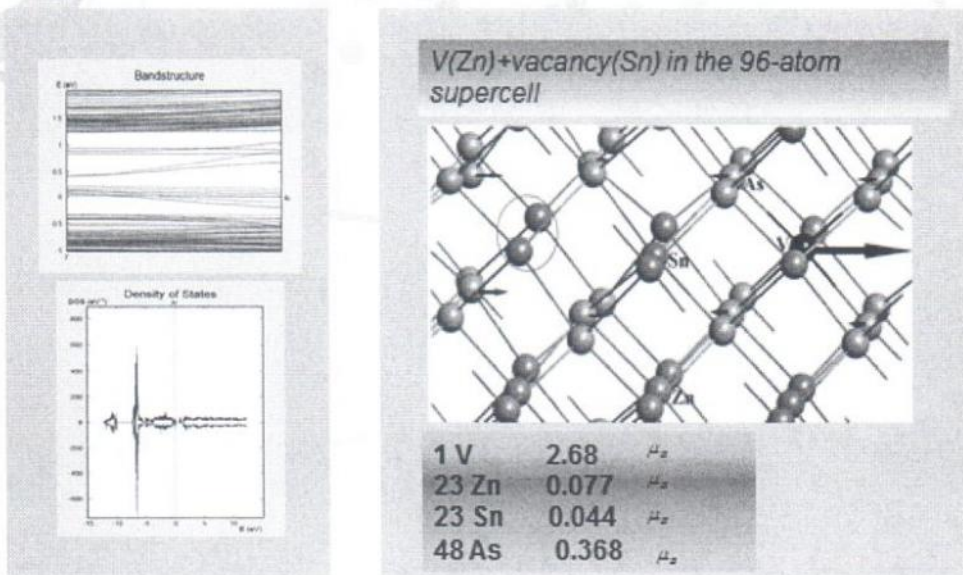


Şək.4. 96 atomluq geniş özəkdə 1 ədəd V(Sn) əvəzətməsi və əlavə olaraq 1 ədəd vacancy(Zn) halında elektron zona quruluşu, DOS, meydana gələn maqnitləşmə və maqnitləşmədə atomların iştirak payı. (Zn atomları göy, Sn atomları yaşıl, As atomları isə çəhrayı rəngdə dairelərlə təsvir edilmişdir. Kimyəvi rabitədə olan yaxın atomlar biri-biri ilə qollarla birləşdirilmişdir). Diqqət edin! Vakansiya olaraq dopant V atomunun rabitədə olduğu As atomlarından biri ilə rabitədə olan Zn atomu seçilmişdir.

V(Sn) əvəzətməsi + vacancy (Sn) halında (Şək.5) V atomu $2.207 \mu_B$ maqnit momenti qazanır. 24 ədəd Zn atomları maqnitlənməni $0.081 \mu_B$, 22 ədəd Sn atomları $0.031 \mu_B$, 48 ədəd As atomları isə daha böyük olmaqla $0.966 \mu_B$ zəiflədirlər. Sonuncu halda əsas pay yenə də dopant V atomu ilə kimyəvi rabitədə olan 4 ədəd As atomuna düşür. Yekun maqnit momenti $1.129 \mu_B$. Yəni, vacancy (Zn) hesabına V(Sn) əvəzətməsi ilə yaranmış maqnit momenti $\sim 0.13 \mu_B$ artır.



Şek.5. 96 atomluq geniş özəkdə 1 ədəd V(Sn) əvəzetməsi və əlavə olaraq 1 ədəd vacancy(Sn) halında elektron zona quruluşu, DOS, meydana gələn maqnitləşmə və maqnitləşmədə atomların iştirak payı. (Zn atomları göy, Sn atomları yaşıl, As atomları isə çəhrayı rəngdə dairelərlə təsvir edilmişdir. Kimyəvi rabitedə olan yaxın atomlar biri-biri ilə qollarla birləşdirilmişdir). Vacansiya olaraq dopant V atomundan kifayət qədər uzaqda olan Sn atomu seçilmişdir.



Şek.6. 96 atomluq geniş özəkdə 1 ədəd V(Zn) əvəzetməsi və əlavə olaraq 1 ədəd vacancy(Sn) halında elektron zona quruluşu, DOS, meydana gələn maqnitləşmə və maqnitləşmədə atomların iştirak payı. (Zn atomları göy, Sn atomları yaşıl, As atomları isə çəhrayı rəngdə dairelərlə təsvir edilmişdir. Kimyəvi rabitedə olan yaxın atomlar biri-biri ilə qollarla birləşdirilmişdir). Vakansiya olaraq dopant V atomundan bir qədər uzaqda olan Sn atomu seçilmişdir.

V(Zn) əvəzetməsi + vacancy (Sn) halında (Şək.6) V atomu $2.68 \mu_B$ maqnit momenti qazanır. 23 ədəd Zn atomları maqnitlənməni $0.077 \mu_B$, 23 ədəd Sn atomları $0.044 \mu_B$, 48 ədəd As atomları isə daha böyük olmaqla $0.368 \mu_B$ gücləndirirlər! As atomlarının iştirakı unikaldir. Dopant ətrafında onunla kimyavi rabitədə olan As atomları sahəni zəiflədir, Vacancy(Sn) ətrafında olan rabitələrindən birini itirmiş 4 ədəd As atomları isə sahəni gücləndirirlər və həlledici pay məhz onlara məxsusdur. Yekun maqnit momenti $3.169 \mu_B$. Yəni, vacancy (Sn) hesabına V(Zn) əvəzetməsi ilə yaranmış maqnit momenti $\sim 0.17 \mu_B$ artır.

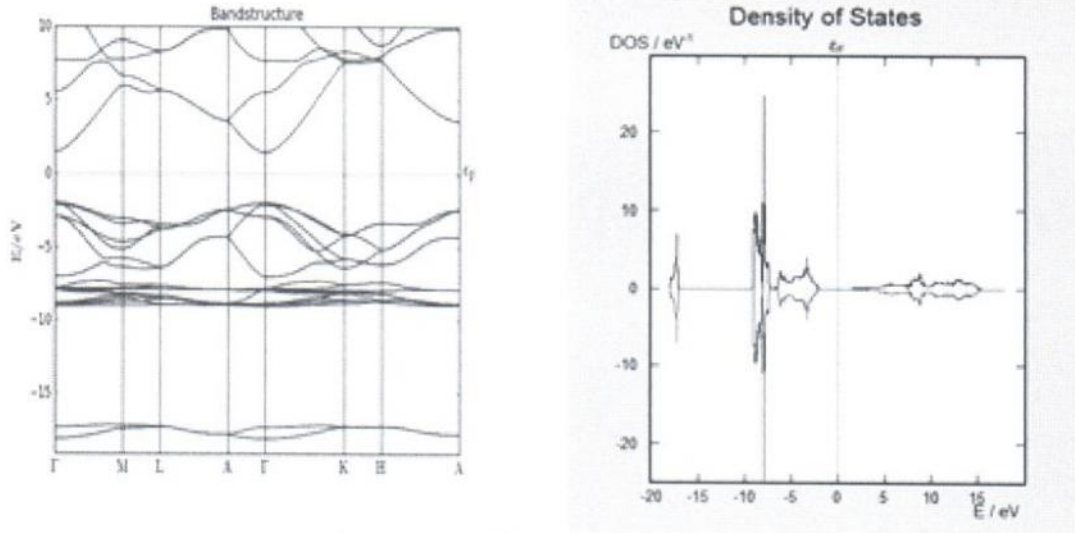
ZnSnAs₂ geniş özəklər ilə yerinə yetirilmiş hesablamalarla müəyyən edilmişdi ki, ayrılıqda Zn-, Sn- və As-vakansiyalarının mövcudluğu hesabına bu materialda maqnit xassələri meydana çıxır. Maqnit momentinin qazanılmasında tərkibdəki bütün atomlar özünəməxsus qaydada iştirak edirlər. As atomlarının, xüsusilə vakansiyanın yaxın ətrafında qırılmış rabitəyə malik As atomlarının verdiyi pay daha üstün olub həlledici xarakter daşıyır. Sonrakı tədqiqatlar bunu deməyə əsas verir ki, hamiltonianda Hubbard_U düzəlişləri nəzərə alınmadığı hallarda təkə vakansiyalar hesabına maqnit xassələrinin meydana çıxması istisna olunur. Tərkibdə Mn(Sn) əvəzləmələri olduqda və Hubbard_U düzəlişlərinin təkə Mn-3d elektronları üçün nəzərə alındığı hallarda Zn- və Sn-vakansiyaları hesabına meydana çıxan maqnit xassələrinin kəskin zəiflədiyi aşkar edilmişdir.

DFT nəzəriyyəsi çərçivəsində təməl prinsiplərdən hesablamalarla xalkopirit quruluşda antiferromaqnit xassəli yeni MnSnAs₂ yarımkeçirici materialın mövcudluğu əsaslandırılmış və bu birləşmənin qəfəs, struktur və maqnit parametrləri hesablanmışdır. Alınan elmi nəticələr təklif olunan yeni maqnit yarımkeçirici materialların spintronikada istifadəsini əsaslandırır və 01-05 sentyabr 2014-cü ildə Yaponiyada keçirilən Beynəlxalq konfransda məruzə edilmişdir ([P3-051], *Ab-initio study of ferromagnetism in Mn-doped ZnSnAs₂*, V. Jafarova¹, S.Huseynova¹, S.Sadigova², G. Orudzhev^{1,2}, N. Uchitomi³, K. Wakita⁴, N.Mamedov¹, ¹*Institute of Physics (Innovation Sector), Azerbaijan*, ²*Azerbaijan Technical Univ.*, ³*Nagaoka Univ. of Tech.*, and ⁴*Chiba Institute of Tech.*, ICTMC-19, 19th International Conference on Ternary and Multinary Compounds, September 1-5, 2014, Niigata, JAPAN, Book of Abstracts, p. 128).

15-20.04.2015-ci il tarixində dövlətə əsasında Türkiyənin Muğla-Fəthiyyə şəhərində keçirilən "5th International Advances in Applied Physics and materials Science Congress, APMAS-2015" (V Beynəlxalq Tətbiqi Fizika sahəsində İrəliləyişlər və Materialşünaslıq Elmi Konqres) beynəlxalq konfransında, "Magnetic properties of chalcopyrite ZnSnAs₂ as a consequence of Mn doping and appeared vacancies" işi poster təqdimatla təqdim edilmişdir.

Hubbard_U parametrləri seçilməklə ZnO birləşməsinin elektron zona quruluşu və elektron hallar sıxlığı hesablanmışdır (Şək.7). Hesablamaların nəticələrinə əsasən ZnO birləşməsi qadağan zolağının eni 3.4 eV olan qeyri-maqnit yarımkeçirici materialdır (spin_up və spin_down halların zonaları üst-üstə düşür). Valent zonasının tavanı Brillouin zonasının mərkəzində yerləşir və üçqat cırlaşmış haldadır. Spin-orbital qarşılıqlı təsirin nəzərə alınması cırlaşmanı qismən aradan qaldırır. Keçirici zonanın dibi də Brillouin zonasının mərkəzində yerləşməklə materialın düzzolaqlı olmasını təmin edir və fundamental udma oblastının kənarının düz keçidlərlə formalaşmasını şərtləndirir. Qeyd edək ki, ZnSnAs₂ də olduğu kimi materialın düzzolaqlı olması onun həm də optoelektronikada istifadəsini (spektrin qırmızı və infraqırmızı hissəsində) mümkün edir. DOS hesablamalarına əsasən Zn-3d hallarından törəyən zonalar valent zonasının tavanından 7.5-8.0 eV aşağıda yerləşməklə materialın elektrik xassələrində az da olsa önəm daşımır. Bu zonalar dar zolaq şəklində (~ 0.5 eV enində) əsas qrup valent zonalardan bir qədər aşağıda yerləşmişlər. Təxminən həmin hissədə, bir qədər yuxarıda olmaqla, Zn-4s hallarından törəyən zonalar qərarlaşmışdır. Qeyd edək ki, Zn-4s hallarından həm də keçirici zonanın aşağı hissəsindəki zonalar törəyir. O-2s hallarından törəyən zonalar valent zonasının tavanından 15--16 eV aşağıda yerləşmişlər. Valent zonasının (0, -5eV) enerji aralığında yerləşən ən yuxarı

hissəsi əsasən O atomlarının 2p-hallarından, qismən Zn-4p hallarından törəyir. Zona quruluşu diaqramından da (Şək.7) görüldüyü kimi, Brillouin zonasının LA və HA simmetrik xətləri üzrə zonaların ikiqat cırılması baş verir.



Şək.7 ZnO birləşməsinin zona quruluşu (sol) və elektron hallar sıxlığı (sağ)

ZnO qeyri-mağnit yarımkəçiricidə Cr(Zn) və ya Cr(O) əvəzləmələri hər iki halda ferromağnetizmə gətirir. (Digər Co(Zn), Mn(Zn), Cr(Zn), Ni(Zn) əvəzləmələrində materialda spin AFM düzülüşü üstünlük təşkil edir.) Tam enerji hesablamalarından müəyyən edilmişdir ki, ZnO-nu 3d keçid elementi Cr ilə aşqarladıqda ($x=1/12, 1/16, 1/24, 1/32, 1/48$ konsentrasiyalarda) ferromağnit xassələri meydana çıxır. Tədqiq edilən ZnO birləşməsində Zn vakansiyaları mövcud olması halında FM, O vakansiyası halında isə AFM spin düzülüşləri meydana çıxır. Birləşmə üçün Cr(Zn)+Zn vakansiyası halında özəyin maqnit momenti vakansiyasız hal ilə müqayisədə $1.389\mu_B$, Cr(Zn)+O vakansiyası halında $0.037\mu_B$ kiçikdir. Mulliken analysis-dən və total energy hesablamalarının nəticələrinə əsasən O vakansiyası Zn vakansiya ilə müqayisədə energetik cəhətdən daha əlverişlidir. Qeyd etmək istərdik ki, Belarus tərəfin VASP proqramlar paketi ilə aldığı nəticələr bizim ATK ilə aldığımız nəticələri təsdiq edir. 96 atomluq $Zn_{48}O_{48}$ geniş özək üçün ATK və VASP proqram paketləri ilə maqnit momenti hesablamalarından alınmış nəticələrin müqayisəsi aşağıdakı cədvəldə verilmişdir.

Defektin növü (tipi)	$\mu(\mu_B)$ (ATK)	$\mu(\mu_B)$ (VASP)	$\mu(\mu_B)$ (ATK)- $\mu(\mu_B)$ (VASP), %
1 C(Zn)	3,3840	3,1754	6,16
2 Cr(Zn)	6,7810	6,0054	11,44
1 Cr(Zn)+ Vacation(Zn)	2,0000	2,0037	-0,19
1 Cr(Zn) + Vacation(O)	3,3000	3,1383	4,9
2 Cr(Zn) + Vacation(Zn)	5,9970	5,9978	-0,01
2 Cr(Zn) + Vacation(O)	6,6830	6,9970	-4,7

$Zn_{48}O_{48}$ superözək üçün aparılan hesablamalardan müəyyən edilmişdir ki, O atomunun sayı çox olduqda ($Zn_{48}O_{49}$) ferromağnit xassələri meydana çıxır və özəyin maqnit momenti $1.83\mu_B$ olur (VASP ilə $2\mu_B$ -dur).

96 atomluq özəkdə Cr(Zn) əvəzlənməsi və Zn vakansiyası hesabına özəyin maqnit momenti

vakansiyasız hal ilə müqayisədə $1.389\mu_B$ azalaraq $1.995\mu_B$ olur:

	Number of atoms	Spin up	Spin down	μ (μ_B)
1	Cr	3,712	1,635	2,077
46	Zn	261,095	261,074	0,021
48	O	159,194	159,297	-0,103

96 atomluq özəkdə Zn atomlarından birini Cr ilə əvəzləyərək maqnitlənməyə gətirir. Strukturda Zn və O vakansiyalarının mövcudluğu maqnit momentini kiçildir.

	Number of atoms	Spin up	Spin down	μ (μ_B)
1	Cr	4,18	1,067	3,113
47	Zn	261,679	261,458	0,221
47	O	161,815	161,802	0,013

ZnO tədqiqatları üzrə alınan mühüm nəticələr:

1. Tam enerji hesablamalarından müəyyən edilmişdir ki, ZnO-nu 3d keçid elementləri V və Cr ilə aşqarladıqda ($x=1/12, 1/16, 1/24, 1/32, 1/48$ konsentrasiyalarda) ferromaqnit, digərləri (Mn, Fe, Co, Ni, Cu) ilə aşqarladıqda antiferromaqnit xassələri meydana çıxır.
2. ZnO birləşməsində Zn vakansiyası halında ferromaqnit, O vakansiyası halında isə antiferromaqnit xassələri meydana çıxır.
3. Birləşmə üçün Cr(Zn)+Zn vakansiyası halında özəyin maqnit momenti vakansiyasız hal ilə müqayisədə $1.389\mu_B$, Cr(Zn)+O vakansiyası halında $0.037\mu_B$ kiçikdir.
4. Müəyyən edilmişdir ki, $Zn_{48}O_{49}$ özəyi üçün aparılan hesablamalardan ferromaqnit xassələri meydana çıxır və özəyin maqnit momenti $1.83\mu_B$ (VASP ilə $2\mu_B$ -dur) olur. Zn atomlarının sayının artırılması ilə aparılan tədqiqatlar (geniş özək $Zn_{49}O_{48}$ ilə) materialın antiferromaqnetik olaraq qaldığına dəlilətdir.

Defektin növü (tipi)	μ_B (ATK)	μ_B (VASP)	μ_B (ATK) - μ_B (VASP), %
1 Cr(Zn)	3,3840	3,1754	6,16
2 Cr(Zn)	6,7810	6,0054	11,44
1 Cr(Zn)+ Vacation(Zn)	2,0000	2,0037	-0,19
1 Cr(Zn) + Vacation(O)	3,3000	3,1383	4,9
2 Cr(Zn) + Vacation(Zn)	5,9970	5,9978	-0,01
2 Cr(Zn) + Vacation(O)	6,6830	6,9970	-4,7

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

Çapdan çıxmış işlər:

1. V. Jafarova, S. Huseynova, S. Sadigova, G. Orudzhev, N. Uchitomi, K. Wakita, N. Mamedov. Ab-initio study of ferromagnetism in Mn-doped $ZnSnAs_2$. ICTMC-19 19th

International Conference on Ternary and Multinary Compounds. September 1-5, Niigata, JAPAN. Book of Abstracts, P3-051, p.128.

2. S. Huseynova, G. Orudzhev, V. Jafarova. Ferromagnetism in $ZnSn_{1-x}V_xAs_2$ and $ZnSn_{1-x}Cr_xAs_2$ supercells. "The role of multidisciplinary approach in solution of actual problems of fundamental and applied sciences (earth, technical and chemical)", 1st International Scientific Conference of young scientists and specialists, 2014, 15-16 October, Baku, Azerbaijan, p. 208.
3. G. Orudzhev, S. Huseynova, V. Jafarova, S. Sadigova, S. Hamidov, V. Stempitsgy, O. Kozlova "Effect of vacancies on magnetic properties of $ZnSnAs_2$ " VII Eurasian Conference "Nuclear science and its application", 21-24 October, 2014, Baku, Azerbaijan, p.192-193.
4. Г. Оруджев, С. Гусейнова, В. Джафарова, С. Садыгова, С. Гамидов, В. Стемпицкий, О. Козлова, М. Зеленина. Влияние вакансий и легирования ванадием на магнитные свойства $ZnSnAs_2$, 1-ая Азербайджано-Белорусская международная конференция, 21-22.10.2014, Баку, Азербайджан, стр.12-15.
5. О. Козлова, Г. Оруджев, В. Стемпицкий. Ab initio моделирование магнитных свойств наноструктур на основе ZnO , 1-ая Азербайджано-Белорусская международная конференция, 21-22.10.2014, Баку, Азербайджан, стр.29-31.
6. О. Козлова, Г. Оруджев, В. Стемпицкий. Электронные свойства квази-двухмерных наноструктур на основе дихальгенидов переходных металлов IV группы, 1-ая Азербайджано-Белорусская международная конференция, 21-22.10.2014, Баку, Азербайджан, стр.38-41.
7. V. N. Jafarova. Ab-initio study of ferromagnetism in Cr-doped ZnO . III International Scientific Conference of Young Researchers, 17-18, April 2015, Baku, Azerbaijan, p. 103-104.
8. V. Jafarova, S. Huseynova, S. Sadigova, G. Orudzhev, N. Uchitomi, K. Wakita, N. Mamedov. Ab-initio study of ferromagnetism in Mn-doped $ZnSnAs_2$. Phys. Status Solidi c 12, No 6, 668-671 (2015).

5 İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər

(burada doldurulmalı)

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

19-24.08.2014-cü il tarixində layihə rəhbəri professor H. S. Orucov və layihə iştirakçısı fizika üzrə fəlsəfə doktoru S.S. Hüseynova Belarusiyanın Minsk şəhərində Belarusiya Dövlət İnformatika və Radioelektronika Universitetində (BDİRU) ezamiyyətdə oldular. Belarusiya tərəfdən EİF-BGM-2-BRFTF-1-2013-07/03/1-M-05 layihə iştirakçıları ilə görüşlər keçirildi. BDİRU-da təşkil olunmuş görüşdə layihənin belaruslu həmrəhbəri texnika elmləri üzrə fəlsəfə doktoru Viktor Romanoviç Stempitski və layihə iştirakçıları ilə "3d keçid elementləri ilə aşqarlanmış defekt quruluşlu ZnO və $ZnSnAs_2$ birləşmələrinin struktur, elektron və maqnit xassələrinin təməl prinsiplərdən tədqiqi" adlı Azərbaycan-Belarus birgə grant layihəsi çərçivəsində aparılmış tədqiqatların nəticələri müzakirə edildi. Layihə rəhbəri H.Orucov 21.08.2014-cü il tarixdə Universitetin Nano- və mikroelektronika kafedrasında "3d-elementi vanadium ilə aşqarlanmış $ZnSnAs_2$ birləşməsinin elektron, struktur və maqnit xassələri" mövzusunda məruzə etmişdir.

Prof. H.S. Orucov 01-06.09.2014 il tarixində Yaponiyada ezamiyyətdə olmuşdur. "Ab-initio study of ferromagnetism in Mn-doped $ZnSnAs_2$ " adlı poster məruzə ilə 19th International Conference on Ternary and Multinary Compounds (ICTMC-19) konfransında iştirak etmişdir. Konfransda iştirakın maliyyə xərcləri AMEA Fizika İnstitutunun hesabına ödənilmişdir.

Layihə iştirakçısı S.S. Hüseynova 15-20.04.2015-ci il tarixində Türkiyənin Muğla-Fəthiyyə şəhərində ezamiyyətdə olmuşdur. O, "Magnetic properties of chalcopyrite $ZnSnAs_2$ as a consequence of Mn doping and appeared vacancies" adlı poster məruzə ilə 5th International Advances in Applied Physics and Materials Science Congress (APMAS-2015) konfransında iştirak etmişdir. Həmin konfransda iştirakın maliyyə xərcləri AMEA Fizika İnstitutunun hesabına ödənilmişdir.

16-23.08.2015-ci il tarixində layihə rəhbəri professor H.Orucov və layihə iştirakçısı elmi işçi S.V. Həmidov Belarusiyanın Minsk şəhərində Belarusiya Dövlət İnformatika və Radioelektronika Universitetində (BDİRU) ezamiyyətdə oldular. Belarusiya tərəfdən EİF-BGM-2-BRFTF-1-2013-07/03/1-M-05 layihə iştirakçıları ilə görüşlər keçirildi. BDİRU-da təşkil olunmuş görüşdə layihənin belaruslu həmrəhbəri texnika elmləri üzrə fəlsəfə doktoru V.R. Stempitski və layihə iştirakçıları M.S. Zelenina, Ya.V. Dolqaya, V.A. Skaçkova ilə "3d keçid elementləri ilə aşqarlanmış defekt quruluşlu ZnO və $ZnSnAs_2$ birləşmələrinin struktur, elektron və maqnit xassələrinin təməl prinsiplərdən tədqiqi" adlı Azərbaycan-Belarus birgə qrant layihəsi çərçivəsində aparılmış tədqiqatların nəticələri müzakirə edildi. Prof. H.Orucov Universitetin Nano- və mikroelektronika kafedrasında "3d-elementi vanadium ilə aşqarlanmış $ZnSnAs_2$ birləşməsinin elektron, struktur və maqnit xassələri" mövzusu ətrafında əməkdaşlarla birgə müzakirələr aparmışdır.

Ezamiyyət müddətində həmçinin Belarusiya Dövlət İnformatika və Radioelektronika Universitetində BDİRU-nin birinci prorektoru A.N. Osipov, Beynəlxalq əməkdaşlıq mərkəzinin rəisi A.F. Titoviç və rəis müavini İ.V. Letkovskaya ilə görüşlər keçirilmişdir.

7 Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak (əgər varsa)
(burada doldurmalı)

8 Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak

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

Layihə rəhbəri 01-05.09.2014-cü il tarixdə Yaponiyanın Niigata şəhərində keçirilmiş XIX beynəlxalq konfransda (ICTMC-19) iştirak etmiş və "Ab-initio study of ferromagnetism in Mn-doped $ZnSnAs_2$ " adlı poster məruzə ilə çıxış etmişdir. Məruzə tezis formasında konfrans materiallarında dərc olunmuş, material genişləndirilərək məqalə şəklində çapa hazırlanmış və Physica Status Solidi (c) jurnalında dərc olunmuşdur.

2014-cü il oktyabrın 21-də Bakıda Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Elmin İnkişafı Fondunun təşkilatçılığı ilə Birinci Azərbaycan-Belarus Beynəlxalq konfransında professor H.S. Orucov "Effect of vanadium doping and vacancies on magnetic properties of $ZnSnAs_2$ " mövzusunda məruzə etmişdir. Konfransda həmçinin Belarus tərəfdən layihə həmrəhbəri texnika elmləri üzrə fəlsəfə doktoru Viktor Romanoviç Stempitçki və layihə iştirakçısı Olqa Aleksandrovna Kozlova məruzələr etmişlər. Məruzələr aşağıdakılardır:

1. O. Kozlova, Г. Оруджев, В. Стемпицкий. "Ab initio моделирование магнитных свойств наноструктур на основе ZnO "

2. O. Kozlova, Г. Оруджев, В. Стемпицкий. "Электронные свойства квази-двумерных наноструктур на основе дихалькогенидов переходных металлов IV группы".

2014-cü il oktyabrın 21-də Bakıda keçirilən "Nüvə elmləri və onun praktiki aspektləri" adlı VII

Avrasiya Beynəlxalq konfransında layihə iştirakçısı fizika üzrə fəlsəfə doktoru Cəfərova Vüsələ "Influence of vacancies on magnetic properties of ZnSnAs₂" mövzusunda məruzə etmişdir.

Layihə rəhbəri H. S. Orucov 14.11.2014-cü il tarixdə Azərbaycan Texniki Universiteti Elektronika kafedrasının seminarında "3d-elementi Vanadium ilə aşqarlanmış ZnSnAs₂ birləşməsinin elektron, struktur və maqnit xassələri" mövzusunda məruzə etmişdir.

Prof. H.S. Orucov AzTU "Elektronika" kafedrasının 12 dekabr 2014-cü il tarixli seminarında "3d keçid elementlərinin təsiri altında üçqat ZnSnAs₂ birləşməsində meydana gələn maqnit xassələri" mövzusunda məruzə etmişdir.

2015-ci il 17-18 aprelə Qafqaz Universitetində keçirilən "Gənc Tədqiqatçıların III Beynəlxalq Elmi konfransında" layihə iştirakçısı fizika üzrə fəlsəfə doktoru V. N. Cəfərova "Ab-initio study of ferromagnetism in Cr-doped ZnO" mövzusunda məruzə etmişdir.

Layihə iştirakçısı S.S. Hüseynova 15-20.04.2015-ci il tarixində Türkiyənin Muğla-Fəthiyyə şəhərində keçirilən "5th International Advances in Applied Physics and Materials Science Congress, APMAS-2015" konfransında "Magnetic properties of chalcopyrite ZnSnAs₂ as a consequence of Mn doping and appeared vacancies" mövzusunda poster təqdimatla çıxış etmişdir.

10	Layihə üzrə əldə olunmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar, komplektləşdirmə məmulatları (burada doldurmalı)
11	Yerli həmkarlarla əlaqələr AMEA Fizika İnstitutunun direktoru, f.r.e.d., prof. N.T. Məmmədov, AMEA Radiasiya Problemləri İnstitutunun aparıcı elmi işçisi f.r.e.n. M.A. Mehrabova, AMEA Fizika İnstitutunun əməkdaşı fizika elmləri doktoru Z.A. Cahangirli ilə elmi əlaqələr davam etdirilir.
12	Xarici həmkarlarla əlaqələr Belarus Dövlət İnformatika və Radioelektronika Universiteti Mikro- və nanoelektronika kafedrasının əməkdaşları texnika elmləri namizədi, dos. Viktor Romanoviç Stempitski, "Mikro- və nanoelektronika sistemlərinin və cihazlarının modeləşdirilməsi və layihələndirilməsi" elmi-tədqiqat laboratoriyasının mühəndisi Kozlova Olqa Aleksandrovna və layihənin digər iştirakçıları ilə elmi əlaqələr davam etdirilir. Yaponiyalı mütəxəssislərdən Kazuki Wakita, Hisao Uchiki və Naotaka Uchitomi ilə əlaqələr gücləndirilmişdir. Yaponiyalı alim M. Ishikawa və Türkiyəli alim Oral Oltulu ilə yeni əlaqələr qurulmuşdur. Danimarkalı alim və VNL-ATK proqramının baş meneceri və təminatçısı Anders Blom ilə əlaqələr davam etdirilir.
13	Layihə mövzusu üzrə kadr hazırlığı (əgər varsa) (burada doldurmalı)
14	Sərgilərdə iştirak (əgər baş tutubsa) 11 noyabr 2014 cü il tarixdə layihə iştirakçısı Suma Hüseynova Bakı elm festivalında təşkilatçı qismində iştirak etmişdir. Həmçinin Gənc Alim və Mütəxəssislər şurasının təşkil etdiyi beynəlxalq konfransda texniki bölmənin moderatoru kimi və layihə çərçivəsində məruzə etmişdir.

15 Təcrübəartırmada iştirak və təcrübə mübadiləsi (əgər baş tutubsa)
(burada doldurmalı)


16 Layihə mövzusu ilə bağlı elmi-kütləvi nəşrlər, kütləvi informasiya vasitələrində çıxışlar, yeni yaradılmış internet səhifələri və s. (məlumatı tam şəkildə göstərməlidir)
Layihə iştirakçısı Suma Hüseynova AzTV və İTV-də (Müzakirə vaxtı) yayımlanan verilişlərdə iştirak etmişdir. Çıxışında qeyd etmişdir ki, gəncləri belə birgə layihələrə cəlb etmək vacibdir belə ki, birgə layihələr onların elmi-tədqiqat işlərində əlavə stimül verir.

SİFARİŞÇİ:
Elmin İnkişafı Fondu

Müşavir
Babayeva Ədilə Əli qızı



(imza)
" 17 09 2015-ci il

Baş məsləhətçi
Daşdəmirova Xanım Faiq qızı


(imza)
" 17 08 2015-ci il

İCRAÇI:

Layihə rəhbəri
Orucov Hüseyn Surxay oğlu


(imza)
" 11 sentyabr 2015-ci il