

# AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

*Əlyazma hüququnda*

## **Tl-Pb-B<sup>V</sup>-Ln-Te (B<sup>V</sup> -Sb, Bi; Ln- Sm, Tb) SİSTEMLƏRİNİN BƏZİ QATILIQ MÜSTƏVİLƏRİ ÜZRƏ FAZA TARAZLIQLARININ TƏDQIQI VƏ MODELƏŞDİRİLMƏSİ**

İxtisas: 2307.01 – fiziki kimya

Elm sahəsi: Kimya

İddiaçı: **Qənirə İlqar qızı Ələkbərzadə**

Fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi almaq üçün  
təqdim olunmuş dissertasiyanın

### **AVTOREFERATI**

**Bakı – 2024**

İş Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun "Funksional qeyri-üzvi birləşmələrin termodinamikası" laboratoriyasında və Milli Aerokosmik Agentliyin Ekologiya İnstitutunun "Radioekoloji və ekokimyəvi tədqiqatlar" şöbəsində yerinə yetirilmişdir.

**Elmi rəhbər:**

AMEA-nın müxbir üzvü, professor  
**Məhəmməd Baba oğlu Babanlı**

**Rəsmi opponentlər:**

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

kimya üzrə fəlsəfə doktoru, dosent  
**Fuad Şəmsəddin oğlu Kərimli**

kimya üzrə fəlsəfə doktoru, dosent  
**Leyla Fərhad qızı Məşədiyeva**



Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Ali Attestasiya Komissiyasının Bakı Dövlət Universiteti 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  
**Farid Nadir oğlu Nağıyev**

Elmi seminarın sədri:



## İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

**Mövzunun aktuallığı və işlənmə dərəcəsi.** Müasir texnikanın müxtəlif təyinətli funksional materiallara olan tələblərinin durmadan artması yeni belə materialların axtarışı və onların alınmasının elmi əsaslarının yaradılması sahəsində tədqiqatları stimullaşdırır, bu işə materialşünaslığın yüksək texnoloji bir elm sahəsi kimi inkişafına təkan verir.

Əsrimizin ilk onilliyində materiyanın qeyri-adi kvant halı olan topoloji izolyatorun kəşfi yeni unikal, hətta ekzotik fiziki xassələrə malik olan funksional materialların yaradılmasına geniş imkanlar açdı ki, bu da elektron sənayesinin və yüksək texnologiyaların bir sıra digər sahələrinin inkişafında yeni dövrün başlanğıcını qoydu<sup>1</sup>.

Topoloji izolyatorun kəşfindən sonrakı ilk illərdə aparılan tədqiqatlar göstərdi ki, uzun illər ərzində termoelektrik materiallar kimi geniş tədqiq olunan ağır metal telluridləri və onlar əsasında çoxkomponentli fazaların bir çoxu topoloji izolyator xassələrinə malikdirlər. Bu materiallar sırasında talliumun  $p^2$  və  $p^3$ - elementlərlə telluridləri, o cümlədən  $TlB^VTe_2$ ,  $Tl_9B^VTe_6$ ,  $Tl_4A^{IV}Te_3$  ( $A^{IV}$ -Sn, Pb ;  $B^V$ -Sb, Bi) tipli birləşmələr xüsusi yer tutur. Hazırda həmin birləşmələr yalnız termoelektrik materiallar<sup>2</sup> kimi deyil, spintronikada, kvant hesablamalarında, optoelektronikada, skanedicu qurğularda və bir çox başqa sahələrdə istifadə üçün olduqca perspektivli materiallar kimi tədqiqatçıların diqqət mərkəzindədir<sup>3</sup>.

Elementlərin dövrü sistemindəki xüsusi mövqeyinə görə tallium eyni birləşmədə iki müxtəlif oksidləşmə dərəcəsinə (+1; +3) və fərqli koordinasiya vəziyyətlərində ola bilər. Bu hal iki tallium telluridində -  $TlTe$  və  $Tl_5Te_3$  birləşmələrində də müşahidə olunur. Həmin birləşmələrdə tallium atomları  $1^+$  və  $3^+$  oksidləşmə hallarında olub, müxtəlif kristalloqrafik mövqələrə malikdirlər. Bu nöqteyi nəzərdən  $TlB^VTe_2$  birləşmələrinə

---

<sup>1</sup> Moore, J.E. The birth of topological insulators // Nature, 2010, v. 464, p.194–198

<sup>2</sup> Шевельков А.В. Химические аспекты создания термоэлектрических материалов // Успехи химии, 2008, т.77 (1), с. 3-21

<sup>3</sup> Babanly M.B., Chulkov E.V., Aliev Z. S., Shevel'kov A.V., and Amiraslanov I. R. Phase diagrams in materials science of topological insulators based on metal chalcogenides // Russ. J. Inorg. Chem., 2017, v. 62(13), p. 1703–1729

tallium monotelluridin,  $Tl_9B^VTe_6$  və  $Tl_4A^{IV}Te_3$  birləşmələrinə isə  $Tl_5Te_3$  birləşməsinin üçlü analoqları kimi baxmaq olar. Maraqlıdır ki, qeyd edilən hər üç tip üçlü birləşmənin lantanoid analoqları da mövcuddur:  $TlLnTe_2$ ,  $Tl_9LnTe_6$  və  $Tl_4LnTe_3$  (Ln-nadir torpaq elementi).

Qeyd edilənlər yuxarıda göstərilən tallium telluridlərindən təşkil olunmuş sistemlərin fiziki-kimyəvi tədqiqinin vacibliyini göstərir. Bu birləşmələrin kristal qəfəsində  $p^2$ - və  $p^3$ - elementlərin nadir torpaq elementləri ilə qismən əvəz olunması təkcə onların termoelektrik göstəricilərinin yüksəldilməsinə yox, həm də onlara əlavə funksionallıq, məsələn, maqnit xassələri verilməsinə gətirib çıxara bilər.

Yeni mürəkkəb tərkibli fazaların məqsədyönlü axtarışı və sintezinin fiziki-kimyəvi əsaslarının yaradılması xeyli dərəcədə müvafiq sistemlərdə faza tarazlıqlarının tədqiqi ilə bağlıdır. Faza diaqramları sistemdə yeni birləşmələrin mövcudluğunu göstərməklə yanaşı, onların əmələ gəlmə xarakteri, termiki davamlılığı, homogenlik sahələri, polimorf çevrilmələri və s. haqqında dolğun məlumatlar verir. Yeni çoxkomponentli metal telluridlərinin axtarışı baxımından formul və ya struktur analoqları olan birləşmələrdən təşkil olunmuş sistemlər xüsusi maraq kəsb edir, çünki onlarda geniş bərk məhlul sahələrinin əmələ gəlməsini gözləmək olar. Bu isə tərkibi dəyişməklə baza birləşmələrin funksional xassələrini optimallaşdırmağa imkan yaradır.

**Tədqiqatın obyektı və predmeti.** Qeyd edilənləri nəzərə alaraq dissertasiyanın **tədqiqat obyektləri** kimi  $Tl$ - $Tb$ - $B^V$ - $Te$  ( $B^V$ - $Sb$ ,  $Bi$ ) sistemlərinin  $Tl_2Te$ - $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9B^VTe_6$ ,  $Tl$ - $Pb$ - $Ln$ - $Bi$ - $Te$  ( $Ln$ - $Sm$ ,  $Tb$ ) sistemlərinin  $Tl_4PbTe_3$ - $Tl_9LnTe_6$ - $Tl_9BiTe_6$  qatılıq müstəviləri götürülmüşdür. **Tədqiqatın predmeti** bu sistemlərdə faza tarazlıqlarının tədqiqi və riyazi modelləşdirilməsi olmuşdur.

**Tədqiqatın məqsəd və vəzifələri.** Dissertasiya işinin məqsədi tərkibində nadir torpaq elementi (NTE) saxlayan yeni çoxkomponentli dəyişən tərkibli fazaların əmələ gəlməsi gözlənilən  $Tl_2Te$ - $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9SbTe_6$ ,  $Tl_2Te$ - $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9BiTe_6$ ,  $Tl_4PbTe_3$ - $Tl_9SmTe_6$ - $Tl_9BiTe_6$  və  $Tl_4PbTe_3$ - $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9BiTe_6$  sistemlərində faza tarazlıqları xarakterinin müəyyən edilməsi, faza diaqramlarının riyazi modelləşdirilməsi və termodinamik analizi olmuşdur.

Bu məqsədə nail olmaq üçün aşağıdakı konkret məsələlər qoyulmuş və həll edilmişdir:

✓  $Tl_2Te-TlB^VTe_2-TlLnTe_2$  sistemlərində fiziki-kimyəvi qarşılıqlı təsir xarakterinin təcrübi tədqiqi, onların faza diaqramlarının və müxtəlif "tərkib-xassə" diaqramlarının qurulması;

✓  $Tl_5Te_3$ -tipli tetraqonal quruluşa malik yeni çoxkomponentli bərk məhlullar almaq üçün  $Tl_4PbTe_3-Tl_9BiTe_6-Tl_9LnTe_6$  sistemlərində faza tarazlıqlarının təcrübi tədqiqi, müvafiq həcmi faza diaqramların, onların müxtəlif poli- və izotermik kəsiklərinin qurulması;

✓  $Tl_4PbTe_3-Tl_9BiTe_6-Tl_9LnTe_6$  sistemlərində fazaların likvidus və solidus səthlərinin riyazi modelləşdirilməsi, 3D vizuallaşdırılması və termodinamik analizi;

✓ tədqiq olunan sistemlərdə çoxkomponentli bərk məhlul nümunələrinin fərdi şəkildə alınması və xarakterizə edilməsi.

**Tədqiqat metodları.** Dissertasiyanın mövzusu üzrə tədqiqatlar fiziki-kimyəvi analizin ənənəvi metodları olan differensial termiki analiz (DTA), rentgenfaza analizi (RFA), mikroquruluş analizi (MQA) və skanedici elektron mikroskopiya (SEM) üsulları, və xəlitələrin mikrobərkliyinin ölçülməsilə aparılmışdır. DTA "NETZSCH 404 F1Pegasus system" cihaz və "TC-08 Termocouple Data Logger" elektron məlumat qeydedicisi əsasında yığılmış çoxkanatlı DTA qurğularında aparılmışdır. Ovuntu difraktoqramları Almaniyanın Bruker firmasının D8 ADVANCE və D2 Phaser cihazlarında çəkilmiş və müvafiq difraktometrlərin kompüter təminatı proqramları ilə analiz edilmişdir. SEM şəkilləri JEOLJSM-7600F markalı skanedici elektron mikroskop vasitəsilə əldə edilmişdir. Nümunələrin mikrobərkliklərinin ölçülməsi PIMT-3 markalı cihazda aparılmışdır.

### **Müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar.**

-  $Tl_2Te-TlSb(Bi)Te_2-TlTbTe_2$  sistemlərində faza tarazlıqlarına aid yeni nəticələr, o cümlədən həmin sistemlərin bərkfaza tarazlıqları diaqramları və "tərkib-xassə" diaqramları;

-  $Tl_4PbTe_3-Tl_9BiTe_6-Tl_9Sm(Tb)Te_6$  sistemlərinin T-x-y faza diaqramları, onların bəzi politermik və izotermik kəsikləri;

-  $Tl_4PbTe_3-Tl_9BiTe_6-Tl_9Sm(Tb)Te_6$  sistemlərində fazaların likvidus və solidus səthləri üçün analitik ifadələr və onlar əsasında qurulmuş müvafiq 3D- modellər;

- Yuxarıda göstərilən sistemlərdə aşkar edilmiş yeni dəyişən tə-

kibli fazalar, onların kristalloqrafik, termiki, termodinamik və s. xassələri haqda məlumatlar.

**Tədqiqatın elmi yeniliyi.** İşdə aşağıdakı yeni mühüm elmi nəticələr alınmışdır:

-  $Tl_2Te-TlSbTe_2-TlTbTe_2$  və  $Tl_2Te-TlBiTe_2-TlTbTe_2$  sistemlərinə fiziki-kimyəvi qarşılıqlı təsir xarakteri müəyyən edilmişdir. Hər iki sistemin bərkfaza tarazlıqları diaqramları qurulmuş,  $TlSbTe_2$ ,  $TlBiTe_2$  və  $TlTbTe_2$  birləşmələri əsasında geniş bərk məhlul sahələri aşkar edilmiş, onların homogenlik sahələri təyin olunmuşdur;

- Müvafiq beşkomponentli sistemlərin  $Tl_4PbTe_3-Tl_9BiTe_6-Tl_9LnTe_6$  ( $Ln- Sm, Tb$ ) qatılıq sahələrində faza tarazlıqlarının tam mənzərələri alınmış, bu qatılıq müstəviləri üzrə likvidus və solidus səthlərinin proyeksiyaları, T-x-y faza diaqramlarının bir sıra politermik və izotermik kəsikləri qurulmuş, hər iki tədqiq olunan sistemdə  $Tl_5Te_3$  tipli tetraqonal quruluşa malik fasiləsiz bərk məhlullar aşkar edilmişdir;

-  $Tl_4PbTe_3-Tl_9BiTe_6-Tl_9LnTe_6$  ( $Ln- Sm, Tb$ ) sistemlərində fazaların likvidus və solidus səthləri üçün analitik ifadələr alınmış, onlar əsasında həcmi faza diaqramlarının 3D modelləşdirilməsi və termodinamik analizi həyata keçirilmişdir;

- Aşkar edilmiş yeni çoxkomponentli qeyri-stexiometrik fazaların seçmə nümunələri fərdi şəkildə sintez olunmuş və xarakterizə edilmişlər, onların ərimə xarakteri və temperaturu, kristal qəfəs tipləri və parametrləri, mikrobərklikləri təyin edilmişdir.

**Tədqiqatın nəzəri və praktiki əhəmiyyəti.** Dissertasiyanın tədqiqat obyektləri olan sistemlərdə faza tarazlıqlarına aid təcrübi nəticələr və riyazi modellər, həmçinin aşkar edilən yeni çoxkomponentli fazaların fiziki-kimyəvi xassələri mürəkkəb metal xalkogenidlərinin kimyasını və materialşünaslığını zənginləşdirir. Bu nəticələr müvafiq dəyişən tərkibli fazaların istiqamətli sintezinin və monokristal halında alınması texnologiyalarının işlənməsi üçün elmi əsasdır və bu baxımdan praktiki əhəmiyyət kəsb edir. İşin nəticələrinin praktiki əhəmiyyəti həm də ondan ibarətdir ki, qurulmuş faza diaqramları, onların alınmış riyazi modelləri, həmçinin yeni dəyişən tərkibli fazaların kristalloqrafik, termiki, termodinamik və s. xassələri fundamental fiziki-kimyəvi parametrlər olub, müvafiq elektron-informasiya sistemlərinə və məlumat bazalarına daxil edilə bilər.

**Aprobasiyası və tətbiqi.** Dissertasiyanın mövzusu üzrə 17 elmi əsər, o cümlədən 11 məqalə (6 məqalə WOS və Scopus bazalarında indekslənən elmi jurnallarda) və 6 məruzə tezisi (5 tezis beynəlxalq konfransların materiallarında) çap olunmuşdur.

Dissertasiya işinin əsas nəticələri aşağıdakı elmi konfranslarda məruzə və müzakirə edilmişdir: 3<sup>th</sup>, 5<sup>th</sup> International Turkic World Conference on Chemical Sciences and Technologies, (Baku, Azərbaycan, 10-13 sentyabr, 2017; Sakarya, Turkey, 25-29 oktyabr, 2019); "Высококачественные вещества и материалы. Получение, анализ, применение" XVI всероссийская конференция и IX школа молодых ученых, посвященная 100-летию Г.Г.Девярых (Новгород, Россия, 28-31 may, 2018); II international scientific conference of young researchers dedicated to the 95<sup>th</sup> anniversary of the national leader of Azerbaijan, H.Aliyev, (Baku, Azərbaycan, 27-28 aprel, 2018); Всероссийская конференция "Химия твердого тела и функциональные материалы" и XII всероссийский симпозиум с международным участием "Термодинамика и материаловедение" (Санкт-Петербург, Россия, 21-28 may, 2018); Ümummilli lider H. Əliyevin anadan olmasının 96-cı ildönümünə həsr olunmuş "Müasir təbiət elmlərinin aktual problemləri" (Gəncə, Azərbaycan, 2-3 may, 2019); 14<sup>th</sup> International Conference on Theory and Application of Fuzzy Systems and Soft Computing – ICAFS-2020 (Budva, Montenegro, 27-28 August, 2020).

İşdə aşkar edilən yeni bərk məhlullar potensial termoelektrik, maqnit və topoloji izolyator materiallarıdır və müvafiq fiziki tədqiqatlar aparmaqla onların funksional xassələri optimallaşdırıla və tətbiq üçün tövsiyələr verilə bilər.

"Google Scholar Citations" informasiya sistemindən götürülən məlumatlara görə müəllifin dissertasiya mövzusu üzrə beynəlxalq elmi jurnallarda çap olunan 8 məqaləsinə 31 istinad edilmişdir.

**Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilatın adı.** İş Kataliz və Qeyri-üzvi Kimya İnstitutunun "Funksional qeyri-üzvi birləşmələrin termodinamikası" laboratoriyasında və Milli Aerokosmik Agentliyin Ekologiya İnstitutunun Radioekoloji və ekokimyəvi tədqiqatlar şöbəsində yerinə yetirilmişdir.

**Müəllifin şəxsi iştirakı.** Dissertasiya işində təcrübəli tədqiqatların

aparılması, alınan nəticələrin işlənməsi və materialların çapa hazırlanması, əsasən müəllif tərəfindən həyata keçirilmişdir. Həmmüəllif olduğu elmi əsərlərdə müəllifin payı həlledici olmuşdur.

**Dissertasiyanın struktur bölmələrinin ayrılıqda həcmi qeyd olunmaqla dissertasiyanın işarə ilə ümumi həcmi.** Dissertasiya girişdən, dörd fəsildən, əsas nəticələrdən (simvol sayı 3106), 244 adda istifadə edilən elmi ədəbiyyat siyahısından ibarət olub, 156 səhifə ümumillikdə 173.550 həcmə malikdir. Dissertasiyaya 60 şəkil və 11 cədvəl daxil edilmişdir.

Giriş hissədə (simvol sayı 11270) dissertasiyanın mövzusunun aktuallığı əsaslandırılmış, işin məqsədi, alınan nəticələrin elmi yeniliyi, nəzəri və praktiki əhəmiyyəti göstərilmişdir.

Birinci fəsildə (simvol sayı 49425) dissertasiyanın mövzusu üzrə ədəbiyyat məlumatları verilmiş və təhlil edilmişdir.

İkinci fəsil (simvol sayı 40039) dissertasiya işində istifadə olunan sintez və fiziki-kimyəvi tədqiqat metodlarının qısa şərhinə həsr olunmuşdur.

Üçüncü fəsildə (simvol sayı 31010) Tl-Tb-Sb(Bi)-Te dördkomponentli sistemlərinin  $Tl_2Te$ -TlTbTe<sub>2</sub>-TlSbTe<sub>2</sub> və  $Tl_2Te$ -TlTbTe<sub>2</sub>-TlBiTe<sub>2</sub> qatılıq müstəviləri üzrə faza tarazlıqlarının tədqiqinin nəticələri verilir.

Dördüncü fəsildə (simvol sayı 36546) müvafiq beş komponentli sistemlərin  $Tl_4PbTe_3$ -Tl<sub>9</sub>BiTe<sub>6</sub>-Tl<sub>9</sub>SmTe<sub>6</sub> və  $Tl_4PbTe_3$ -Tl<sub>9</sub>BiTe<sub>6</sub>-Tl<sub>9</sub>TbTe<sub>6</sub> qatılıq müstəviləri üzrə faza tarazlıqlarının təcrübi tədqiqinin, həmçinin termodinamik analizinin və 3D modelləşdirilməsinin nəticələri verilir.

## **İŞİN ƏSAS MƏZMUNU**

**Girişdə** dissertasiyanın mövzusunun aktuallığı əsaslandırılmış, işin məqsədi, alınan nəticələrin elmi yeniliyi, nəzəri və praktiki əhəmiyyəti göstərilmişdir.

**Birinci fəslin** əvvəlində (paraqraf 1.1) talliumun mürəkkəb telluridlərinin funksional xassələri haqqında ədəbiyyat məlumatları verilmiş və işin aktuallığı əsaslandırılmışdır. Göstərilmişdir ki, bu birləşmələr termoelektrik, optik, maqnit xassələri göstərən perspektivli funksional materiallardır. Sonrakı bölmələrdə tədqiqat obyektləri olan



çoxkomponentli sistemlərin sərhəd binar Tl-Te, Sm-Te, Tb-Te sistemlərində (paraqraf 1.2 və 1.3), həmçinin sərhəd üçlü Tl-Pb (Sb,Bi)-Te sistemlərinin  $Tl_2Te-PbTe$ ,  $Tl_2Te-Sb(Bi)_2Te_3$  (paraqraf 1.4) kəsikləri üzrə faza tarazlıqlarına və aralıq fazaların fiziki-kimyəvi xassələrinə aid ədəbiyyat məlumatları təqdim və təhlil olunmuşdur. Bu məlumatlar təcrübi tədqiqatların planlaşdırılmasında və nəticələrin analizində istifadə olunmuşdur.

Fəslin sonuncu paraqrafı (1.5) nadir torpaq elementlərinin telluridləri əsasında çoxkomponentli sistemlərin fiziki-kimyəvi tədqiqinin müasir vəziyyətinin araşdırılmasına həsr olunmuşdur.

**İkinci fəsil** dissertasiya işində istifadə olunan sintez və fiziki-kimyəvi tədqiqat metodlarının qısa şərhinə həsr olunmuşdur.

Tədqiq edilən sistemlərin ilkin binar və üçlü birləşmələrinin sintezi üçün Almaniyanın Alfa Aesar şirkətinin məsulu olan yüksək təmiz bəsit maddələrdən istifadə edilmişdir: qurğuşun (təmizliyin kütlə faizi 99.99, qeydiyyat nömrəsi 7439-92-1, külçə formasında); bismut (99.999, 7440-69-9, külçə); stibium (99.999; 7440-36-0, külçə); tallium (99.99, 13494-80-9, külçə); samarium (99.9, 7440-19-9, kiçik kristallar); terbiyum (99.9, 7440-27-9, kiçik kristallar)

Tədqiqatın ilkin mərhələsində həmin sistemlərdə başlanğıc komponentlər olan məlum binar ( $Tl_2Te$ ,  $Tl_5Te_3$ ) və üçlü birləşmələr ( $Tl_4PbTe_3$ ,  $Tl_9SbTe_6$ ,  $Tl_9BiTe_6$ ,  $Tl_9SmTe_6$ ,  $Tl_9TbTe_6$ ,  $TlSbTe_2$ ,  $TlBiTe_2$ ,  $TlSmTe_2$  və  $TlTbTe_2$ ) sintez və identifikasiya olunmuşdur. Sonrakı mərhələlərdə onlardan istifadə edərək aralıq tərkiblər sintez edilmişdir.

Yuxarıda göstərilən sintez metodlarının təhlilinə əsasən, binar ( $Tl_2Te$ ,  $Tl_5Te_3$ ) və üçlü ( $Tl_4PbTe_3$ ,  $Tl_9SbTe_6$ ,  $Tl_9BiTe_6$  və  $TlBiTe_2$ ) tallium telluridləri konqruent əridilməsi və nisbətən aşağı ərimə nöqtələrini nəzərə alaraq, onlar vakuumlaşdırılmış kvarts ampulalarda yüksək təmizlik dərəcəsinə malik elementar komponentlərin stexiometrik miqdarlarının vakuum şəraitində ( $\sim 10^{-2}$  Pa) birgə əridilməsi ilə sintez olunmuşdur.

$TlSbTe_2$  birləşməsi 753 K-də peritektik reaksiya üzrə parçalanmaqla əridiyindən, birbaşa qarşılıqlı təsirdən sonra nümunə 700 K-də 200 saat termiki emaldan keçirilmişdir.

Elementar samarium və terbiyumun yüksək ərimə temperaturları

(müvafiq olaraq, 1347 və 1628 K), habelə yüksək temperaturlarda onların kvarsla qarşılıqlı təsirdə olmalarını və bir sıra digər çətinlikləri nəzərə alaraq, üçlü tallium-NTE telluridlərinin sintezi daxili divarları toluolun termiki parçalanması yolu ilə qrafitləşdirilmişdir, kvars ampulalarda xüsusi işlənib hazırlanmış üsulla aparılmışdır.

$Tl_9SmTe_6$  və  $Tl_9TbTe_6$  birləşmələrinin sintezi zamanı elementar komponentlərdən deyil, stexiometrik miqdarda  $Tl_2Te$ , elementar lantanoid və tellurdan istifadə edilmişdir, çünki tallium lantanoidlərlə yüksək termodinamik və termiki stabilliyə malik birləşmələr əmələ gətirir və bu üçlü birləşmələrin sintezinə mane olur. Təcrübi olaraq müəyyən edilmişdir ki, 1000 K-də əridilməklə alınan nümunələr tarazlıq halında deyillər. Onların termoqramlarında və difraktoqramlarında bu birləşmələrə aid olmayan əlavə effektlər müşahidə edilmişdir. Bu nümunələri tarazlıq halına maksimal yaxın vəziyyətə gətirmək üçün onlar toz halına salınmış, yaxşıca qarışdırılmış, preslənərək silindrik həb şəklinə gətirilmiş və 700 K-də 1000 saat ərzində termiki emal edilmişlər. Bəzi hallarda bu əməliyyat iki dəfə təkrar olunmuşdur. Yalnız belə sintez metodikası homogen nümunələrin alınmasını təmin etmişdir.  $TlSmTe_2$  və  $TlTbTe_2$  birləşmələrinin sintezi də eyni yolla aparılmışdır. Termiki emal temperaturu 900 K, müddəti isə 1500 saat olmuşdur.

Sintez olunmuş birləşmələr DTA və RFA üsulları ilə identifikasiya olunmuşlar.

Tədqiq edilən sistemlərin nümunələri sintez və identifikasiya olunmuş ilkin binar və üçlü birləşmələrin vakuum şəraitində kvars ampulalarda birgə əridilməsi ilə hazırlanmışdır. Termiki emal olunmamış nümunələrin termoqramları çəkilərək solidus temperaturu müəyyənləşdirilmiş, daha sonra nümunələr solidus temperaturundan 20-50<sup>0</sup> aşağı temperaturlarda uzun müddətli (800-1000 s.) termiki emal edilmişdir. Tarazlıq halının əldə edilməsini sürətləndirmək üçün xəlitələr müəyyən müddət (400-500 saat) termiki emaldan sonra toz halına salınmış, həblərə preslənmiş və həmin temperatur rejimlərində daha 400-500 saat termiki emaldan keçirilmişdir.

Tədqiqatlar DTA, RFA, SEM və MQA üsulları, həmçinin mikrobərkliyin ölçülməsilə aparılmışdır. Nümunələrin ovuntu rentgenoqramları "TopasV3.0 software" kompüter proqramları ilə işlənmişdir.

**Üçüncü fəsildə**  $Tl_2Te-TlTbTe_2-TlSbTe_2$  və  $Tl_2Te-TlTbTe_2-$

TlBiTe<sub>2</sub> sistemlərində faza tarazlıqlarının tədqiqinin nəticələri verilmişdir.

Bu sistemlərin tədqiqinin nəticələri [5, 9-13, 15] işlərində öz əksini tapmışdır.

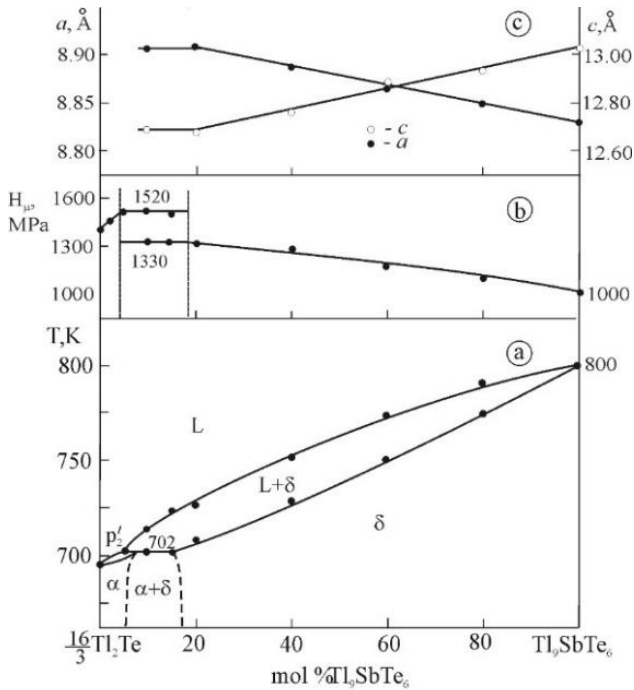
**Tl<sub>2</sub>Te-TlTbTe<sub>2</sub>-TlSbTe<sub>2</sub>** sistemi. Tl<sub>2</sub>Te-TlTbTe<sub>2</sub>-TlSbTe<sub>2</sub> sisteminin Tl<sub>2</sub>Te-TlSbTe<sub>2</sub> və Tl<sub>2</sub>Te-TlTbTe<sub>2</sub> yan tərəflərində əmələ gələn Tl<sub>9</sub>TbTe<sub>6</sub> və Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub> üçlü birləşmələri bu sistemi iki tabeli alt sistemə bölür.

Baxılan alt sistemin üçüncü yan tərəfi Tl<sub>2</sub>Te-Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub> sistemi haqda ədəbiyyatda ziddiyyətli məlumatlar vardır. Müəlliflərin nəticələrinə görə Tl<sub>2</sub>Te-Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub> sistem ilkin birləşmələri arasında qeyri-məhdud bərk məhlulların əmələ gəlməsi ilə xarakterizə olunur. Lakin bəzi mənbələrə görə sistemdə Tl<sub>2</sub>Te yaxınlığında bərk məhlullarda morfootrop faza keçidi müşahidə olunur. Tl<sub>2</sub>Te (F. qr.C2/C) və Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub> (F.qr. I/4m) birləşmələrinin tamamilə fərqli kristal quruluşa sahib olduğunu nəzərə alsaq, bu iddia kifayət qədər əsaslı görünür. Bu sistem üzrə tədqiqatlar çərçivəsində, müvafiq ədəbiyyat məlumatlarının ziddiyyətli olmasını nəzərə alaraq onun Tl<sub>2</sub>Te-Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub> yan tərəfi yenidən tədqiq edilmişdir.

### Cədvəl 1

#### Tl<sub>2</sub>Te-Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub> sistemi üçün DTA nəticələri, mikrobərklik və kristal qəfəs parametrləri

| Faza   | Termik effektlər, K | Mikrobərklik, MPa | Qəfəs parametrləri Å   |
|--|---------------------|-------------------|--|
| Tl <sub>2</sub> Te                                       | 695                 | 1400              | $a = 15.662(8); b = 8.987(4); c = 31.196(12), \beta = 100.760, z = 44$ |
| Tl <sub>9,95</sub> Sb <sub>0,05</sub> Te <sub>5,05</sub> | 702                 | 1515              | -  |
| Tl <sub>9,9</sub> Sb <sub>0,1</sub> Te <sub>5,1</sub>    | 702-715             | 1330; 1520        | -  |
| Tl <sub>9,8</sub> Sb <sub>0,2</sub> Te <sub>5,2</sub>    | 708-728             | 1320              | $a = 8.9098(4); c = 12.6792(10)$                                       |
| Tl <sub>9,6</sub> Sb <sub>0,4</sub> Te <sub>5,4</sub>    | 727-753             | 1270              | $a = 8.8889(5); c = 12.7604(9)$  |
| Tl <sub>9,5</sub> Sb <sub>0,5</sub> Te <sub>5</sub>      | 740-762             | -                 | -  |
| Tl <sub>9,4</sub> Sb <sub>0,6</sub> Te <sub>5,6</sub>    | 750-773             | 1180              | $a = 8.8690(4); c = 12.8416(9)$  |
| Tl <sub>9,2</sub> Sb <sub>0,8</sub> Te <sub>5,8</sub>    | 775-790             | 1100              | $a = 8.8490(3); c = 12.9228(9)$  |
| Tl <sub>9</sub> SbTe <sub>6</sub>                        | 800                 | 1000              | $a = 8.8301(2); c = 13.0039(10)$                                       |



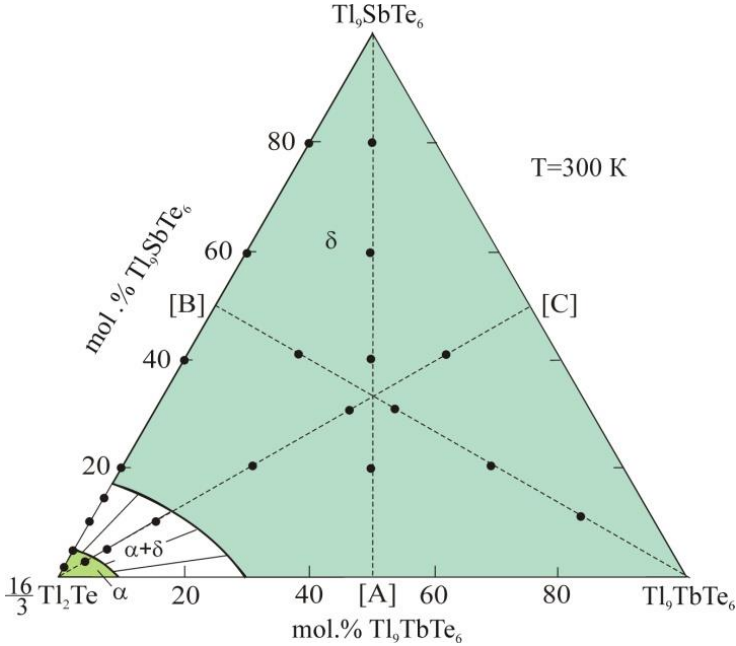
**Şəkil 1. Tl<sub>2</sub>Te-Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub> sisteminin faza diaqramı (a), mikrobərkliliyin (b) və qəfəs parametrlərinin (c) tərkibdən asılılıqları**

Alınmış təcrübi nəticələr (Cədvəl 1) əsasında göstərilmişdir ki, Tl<sub>2</sub>Te-Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub> (şəkil 1) peritektik tipli kvazibinar sistemdir. Peritektik tarazlıqda L+δ↔α olan maye fazanın koordinatları 5 mol % Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub> və 702 K -dir (α- və δ - müvafiq olaraq Tl<sub>2</sub>Te və Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub> əsasında məhlullardır). α- və δ- fazalarının homogenlik sahələri ikifazlı α + δ sahəsi ilə ayrılır.

Peritektik tarazlıq temperaturunda Tl<sub>2</sub>Te üçün homogenlik sahəsi təxminən 7 mol %, Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub> üçün isə 85 mol % təşkil edir. Temperaturun azalması ilə bu sahələr bir qədər daralır və otaq temperaturunda mikrobərklilik ölçmələrinə və RFA nəticələrinə görə ~ 5 və ~ 80 mol % təşkil edir.

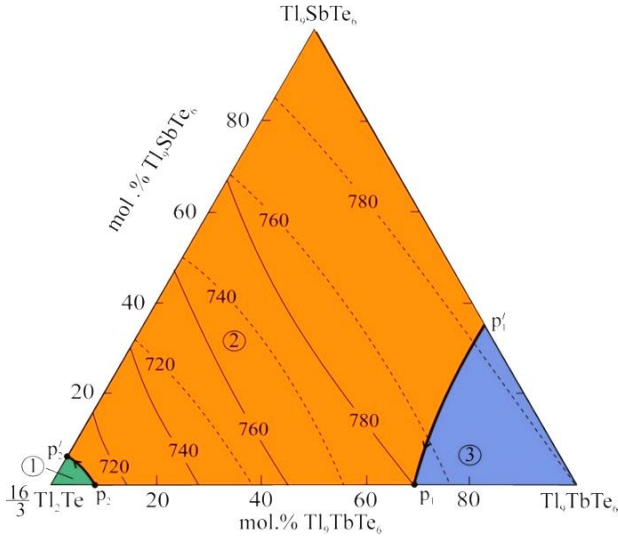
Bu bərk məhlulların qəfəs parametrlərinin və mikrobərkliliklərinin tərkibdən asılılıq ayrılırları üzərində müşahidə olunan sınıma nöqtələri α və δ-fazaların doymuş tərkiblərini göstərir.

**Bərkfaza tarazlıqları diaqramı** (şəkil 2) bu sistemdə otaq temperaturunda faza sahələrinin yerləşməsinə əyani şəkildə göstərir. Göründüyü kimi sistem ikifazlı ( $\alpha+\delta$ ) sahəsi ilə ayrılan iki bərfazlı ( $\alpha$ - və  $\delta$ -) sahədən ibarətdir. Şəkildə həmçinin tədqiq olunan daxili politermik kəsiklər və xəlitələrin tərkibləri göstərilmişdir. Beləliklə, faza diaqramının 300 K-də izotermik kəsiyi göstərir ki,  $\delta$ -fazanın homogenlik sahəsi qatılıq üçbucağının sahəsinin 90%-dən artığını tutur.



**Şəkil 2.  $Tl_2Te$ - $Tl_9SbTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$  sisteminin 300 K temperaturunda bərk faza tarazlıqları diaqramı. Qırıq xətlər və nöqtələr tədqiq olunmuş kəsiklər və xəlitələrdir.**

**Likvidus səthi** (şəkil 3) üç ilkin kristallaşma sahəsindən ibarətdir. Bu sahələrdə maye fazadan ilkin olaraq  $\alpha$ - və  $\delta$ -fazalar (1 və 2 sahələri), həmçinin tərkibcə baxılan qatılıq müstəvisindən kənarında yerləşən  $TlTbTe_2$  birləşməsi (3 sahəsi) kristallaşırlar. Sonuncu sahədə  $TlTbTe_2$  birləşməsinin maye məhluldan ilkin olaraq kristallaşması RFA üsulu ilə təsdiq edilmişdir.



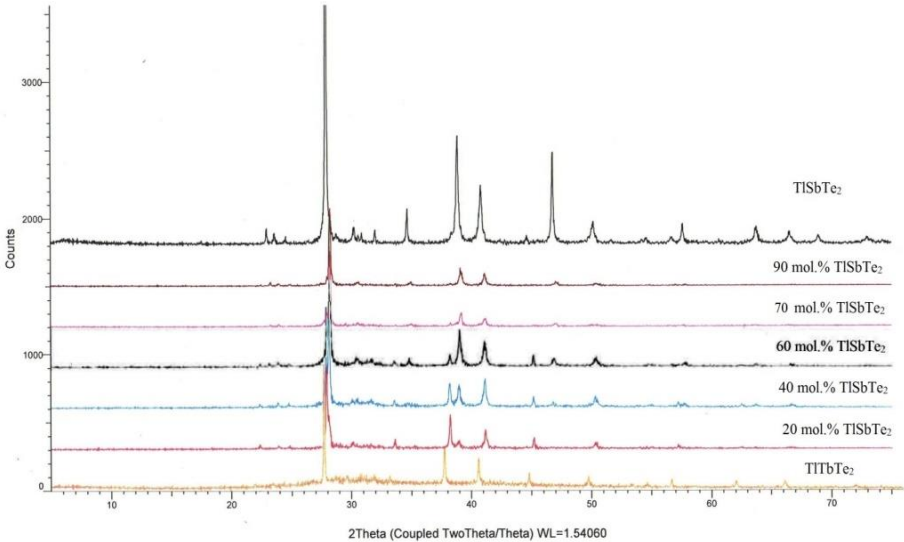
**Şəkil 3.  $Tl_2Te-Tl_9TbTe_6-Tl_9SbTe_6$  sisteminin likvidus səthinin proyeksiyası. İlk kristallaşma sahələri: 1- $\alpha$ ; 2- $\delta$ ; 3-  $TlTbTe_2$ .**

$Tl_2Te-Tl_9SbTe_6-Tl_9TbTe_6$  alt sisteminin bir sıra politermik və izotermik kəsikləri qurulmuşdur. Onlar dissertasiyada verilir və ətraflı şərh olunur.

**$Tl_9TbTe_6-TlTbTe_2-TlSbTe_2-Tl_9SbTe_6$  alt sistemi.** Bu sistemin  $TlSbTe_2-TlTbTe_2$  yan tərəfi üzrə xəlitələrin toz difraktoqramları şəkil 4-də göstərilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi 70 və 90 mol%  $TlSbTe_2$  tərkibli xəlitələrin difraksiya mənzərələri  $TlSbTe_2$  ilə keyfiyyətcə eynidir. Bu onların birləşməli olmasını təsdiq edir. 20, 40 və 60 mol%  $TlSbTe_2$  tərkibli nümunələrin difraksiya mənzərələri isə  $TlSbTe_2$  və  $TlTbTe_2$  birləşmələrinin refleksləri toplularından ibarətdir, yəni onlar faza diaqramlarında qonşu birləşmələr əsasında qarşılıqlı doymuş bərk məhlulların əmələ gətirdikləri ikifazlı xəlitələrdir.

Toz difraktoqramları əsasında fazaların kristal qəfəs tipləri təyin edilmiş və qəfəs parametrləri hesablanmışdır (cədvəl 2). İlk birləşmələr əsasında bərk məhlulların homogenlik sahələrini dəqiqləşdirmək üçün qəfəs parametrlərinin qatılıqdan asılılıq qrafiki qurulmuşdur (şəkil 5). Qrafikdən görüldüyü kimi bərk məhlullarda  $Sb \rightarrow Tb$  əvəzlənməsi zamanı  $a$  parametrlərinin qiyməti azalır,  $c$  parametrlərinin qiyməti

isə artır. Hər iki parametrin tərkibdən asılılıq xətləri ~30 və 90 mol% TlTbTe<sub>2</sub> tərkiblərində sınma nöqtələrinə malikdir. Aralıq tərkiblərdə isə qəfəs parametrləri qatılıqdan asılı olmadan sabit qalırlar. Sınma nöqtələri müvafiq olaraq TlSbTe<sub>2</sub> və TlTbTe<sub>2</sub> əsasında β<sub>2</sub>- və β<sub>1</sub>-bərk məhlulların qarşılıqlı doymuş tərkiblərinə uyğundur. Qeyd etmək lazımdır ki, β<sub>1</sub>+β<sub>2</sub> ikifazlı sahəsində ərintilərin ümumi tərkibindən asılı olmayaraq hər iki fazanın qəfəs parametrlərinin sabit qiymətə malik olması dolayısı ilə xəlitələrin tarazlıq halında olmasını da əks etdirir. β<sub>2</sub> -fazanın homogenlik sahəsində qəfəs parametrlərin qatılıqdan asılılığı xəttidir, yəni Vegard qaydasına tabe olur. Beləliklə, rentgenfaza analizi nəticələrinə görə TlSbTe<sub>2</sub>-TlTbTe<sub>2</sub> sistemi solidusdan aşağıda stabil olub, komponentlərin məhdud qarşılıqlı həllolması ilə xarakterizə olunur. TlSbTe<sub>2</sub> birləşməsi əsasında həllolma 30 mol%, TlTbTe<sub>2</sub> əsasında isə 10 mol% təşkil edir.



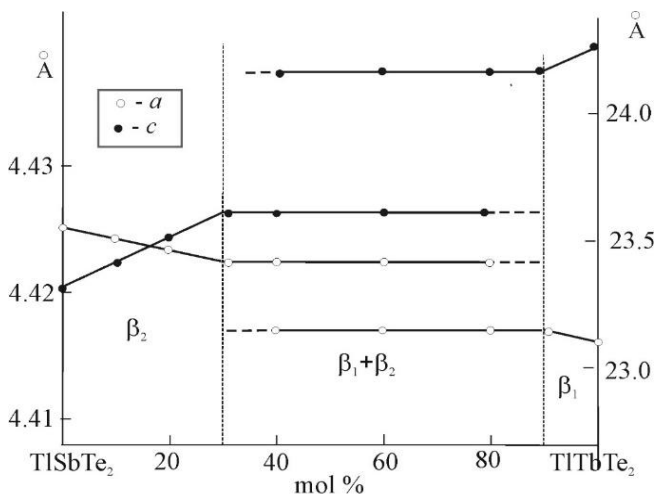
**Şəkil 4. TlSbTe<sub>2</sub>-TlTbTe<sub>2</sub> sisteminin bəzi xəlitələrinin toz difraktoqramları**

TlTbTe<sub>2</sub>-Tl<sub>9</sub>TbTe<sub>6</sub>-Tl<sub>9</sub>SbTe<sub>6</sub>-TlSbTe<sub>2</sub> alt sistemində bərkfaza tarazlıqlarının xarakterini müəyyən etmək üçün bu sahədən götürülmüş, bir neçə termiki emaldan keçirilmiş xəlitə RFA üsulu ilə tədqiq olunmuşdur.

Müəyyən edilmişdir ki,  $Tl_9SbTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$  sistemində əmələ gələn qeyri-məhdud bərk məhlullar ( $\delta$ -faza) sistemin digər 2 birləşməsi əsasında bərk məhlullarla -  $TlTbTe_2$  ( $\beta_1$ ) və  $TlSbTe_2$  ( $\beta_2$ ) qarşılıqlı təsirdə olub,  $\beta_1+\delta$  və  $\beta_2+\delta$  ikifazlı sahələrinin və onları sərhədləndirən  $\beta_1+\beta_2+\delta$  üçfazlı sahəsinin formalaşmasına gətirib çıxarır.

**Cədvəl 2**  
 **$TlSbTe_2$ - $TlTbTe_2$  sistemi üçün bəzi nümunələrinin faza tərkibi və qəfəs parametrləri**

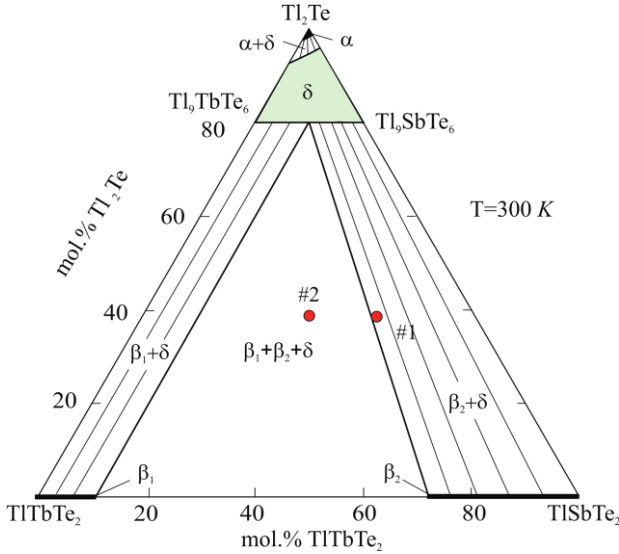
| Tərkib, mol% $TlSbTe_2$ | Faza tərkibi      | Rombik qəfəs parametrləri, Å  |
|-------------------------|-------------------|---|
| 0                       | $\beta_1$         | $a = 4.4245(4)$ ; $c = 23.3025(20)$   |
| 10                      | $\beta_1$         | $a = 4.4238(4)$ ; $c = 23.3751(21)$   |
| 20                      | $\beta_1+\beta_2$ | $\alpha$ - faza: $a = 4.4237(4)$ ; $c = 23.3759(21)$<br>$\beta$ - faza: $a = 4.4180(5)$ ; $c = 24.0061(20)$ |
| 40                      | $\beta_1+\beta_2$ | $\alpha$ - faza: $a = 4.4238(5)$ ; $c = 23.3747(21)$<br>$\beta$ - faza: $a = 4.4183(4)$ ; $c = 24.0024(20)$ |
| 60                      | $\beta_1+\beta_2$ | $\alpha$ - faza: $a = 4.4238(5)$ ; $c = 23.3753(21)$<br>$\beta$ - faza: $a = 4.4184(5)$ ; $c = 24.0052(20)$ |
| 70                      | $\beta_2$         | $a = 4.4180(5)$ ; $c = 23.9991(20)$   |
| 80                      | $\beta_2$         | $a = 4.4173(4)$ ; $c = 24.1754(20)$   |
| 90                      | $\beta_2$         | $a = 4.4165(5)$ ; $c = 24.2516(21)$   |
| 100                     | $\beta_2$         | $a = 4.4155(5)$ ; $c = 24.2682(21)$   |



**Şəkil 5.  $TlSbTe_2$ - $TlTbTe_2$  sistemi üçün qəfəs parametrlərinin qatılıqdan asılılıq qrafiki**



Alınmış nəticələr əsasında  $Tl_2Te-TlTbTe_2-TlSbTe_2$  sisteminin bərkfaza tarazlıqları diaqramı qurulmuşdur (şəkil 6). Göründüyü kimi  $Tl_9TbTe_6-Tl_9SbTe_6$  kəsiyi boyunca əmələgələn fasiləsiz  $\delta$ -bərk məhlulların homogenlik sahəsi talliumla zəngin qatılıqlara doğru kəskin nüfuz edir və qatılıq üçbucağının  $Tl_2Te-Tl_9TbTe_6-Tl_9SbTe_6$  hissəsinin böyük bir hissəsini tutur.



**Şəkil 6.  $Tl_2Te-TlTbTe_2-TlSbTe_2$  sisteminin bərkfaza tarazlıqları diaqramı.**

$Tl_9SbTe_6-Tl_9TbTe_6-TlTbTe_2-TlSbTe_2$  qatılıq sahəsində isə  $\delta$ -fazaın homogenlik sahəsi praktiki olaraq  $Tl_9SbTe_6-Tl_9TbTe_6$  kəsiyindən kənara çıxmır.  $TlTbTe_2-TlSbTe_2$  sərhəd sistemində ilkin birləşmələr əsasında əmələ gələn  $\beta_1$ - və  $\beta_2$ -bərk məhlulların homogenlik sahələri də qatılıq üçbucağı daxilinə az (təxminən 1-2 mol%) nüfuz edir. Qatılıq üçbucağının bu sahəsində  $\delta$ -faza  $\beta_1$ - və  $\beta_2$ -bərk məhlullarla stabil konnodlar və ikifazlı sahələr ( $\beta_1 + \delta$  və  $\beta_2 + \delta$ ) yaradır. Bu sahələr bir-birilə geniş  $\beta_1 + \beta_2 + \delta$  üçfazlı sahəsi ilə sərhədlənilir.

$Tl_2Te-TlTbTe_2-TlSbTe_2$  sisteminin bismutlu analoqu keyfiyyətcə eyni faza tarazlıqları mənzərəsinə malikdir. Həmin sistemin bərkfaza tarazlıqları diaqramı, həmçinin  $Tl_2Te-Tl_9TbTe_6-Tl_9BiTe_6$  qatılıq

sahəsində likvidus və solidus səthlərinin proyeksiyaları, faza diaqramının bir sıra izotermik və politermik kəsikləri dissertasiyada verilmiş və ətraflı şərh olunmuşdur.

**Dördüncü fəsilə** müvafiq beş komponentli sistemlərin  $Tl_4PbTe_3$  -  $Tl_9BiTe_6$  -  $Tl_9SmTe_6$  və  $Tl_4PbTe_3$  -  $Tl_9BiTe_6$  -  $Tl_9TbTe_6$  qatılıq müstəviləri üzrə faza tarazlıqlarının tədqiqinin (4.1 və 4.2. paraqrafları), həmçinin termodinamik analizinin və modelləşdirilməsinin (4.3. paraqrafı) nəticələri verilir.

Bu sistemlərin tədqiqinin nəticələri [1-4, 6-8, 14, 16, 17] işlərində öz əksini tapmışdır.

**$Tl_4PbTe_3$  -  $Tl_9BiTe_6$  -  $Tl_9SmTe_6$  sistemi.** Bu sistemin nümunələri əvvəlcədən sintez və identifikasiya olunmuş ilkin üçlü birləşmələrin vakuumlaşdırılmış kvars ampulalarda birgə əridilməsi ilə hazırlanmışdır. Əridilmə nəticəsində alınmış xəlitələr 700 K-də 800 saat müddətində termiki emaldan keçirilmişdir. Tərkibində 60 mol%-dən artıq  $Tl_9SmTe_6$  olan nümunələr əridilmədən sonra toz halına salınaraq, yaxşı qarışdırılmış, tabletlər halında preslənərək yenidən vakuumlaşdırılmış kvars ampulalarda yerləşdirilmiş və həmin şəraitdə termiki emal edilmişlər. Qatılıq üçbucağının iki yan tərəfi ( $Tl_4PbTe_3$  -  $Tl_9SmTe_6$  və  $Tl_9BiTe_6$  -  $Tl_9SmTe_6$ ) və bəzi daxili kəsikləri üzrə nümunələr hazırlanmışdır. Təcrübi nəticələrin birgə işlənməsi  $Tl_4PbTe_3$  -  $Tl_9SmTe_6$  -  $Tl_9BiTe_6$  sistemində faza tarazlıqlarının qarşılıqlı təsir xarakterini müəyyən etməyə imkan vermişdir.

**$Tl_4PbTe_3$  -  $Tl_9SmTe_6$  və  $Tl_9BiTe_6$  -  $Tl_9SmTe_6$  sistemləri.** Faza diaqramının bu yan tərəfləri üzrə nümunələrin DTA nəticələri, fazaların mikrobərklikləri və kristal qəfəs parametrləri cədvəl 3-də, onlar əsasında qurulmuş faza diaqramları və müvafiq "tərkib-xassə" diaqramları isə şəkil 7-də verilmişdir.

$Tl_4PbTe_3$  -  $Tl_9SmTe_6$  və  $Tl_9BiTe_6$  -  $Tl_9SmTe_6$  kəsikləri (şəkil 7)  $Tl_5Te_3$ -tipli tetraqonal fasiləsiz bərk məhlulların ( $\delta$ -faza) əmələ gəlməsi ilə xarakterizə olunurlar. Lakin onlar  $Tl_9SmTe_6$ -in inkonqruent əriməsi səbəbindən Tl-Pb-Sm-Te və Tl-Bi-Sm-Te dördlü sistemlərinin qeyri-kvazibinar kəsikləri olub, yalnız solidusdan aşağıda stabildirlər. 0-60 mol%  $Tl_9SmTe_6$  qatılıq sahəsində ərintidən ilkin olaraq  $\delta$ -bərk məhlullar,  $Tl_9SmTe_6$  fazası ilə daha zəngin olan qatılıq sahələrində isə  $TlSmTe_2$  kristallaşır. Bu geniş tərkib sahəsində (60-100 mol %  $Tl_9SmTe_6$ ) L+ $TlSmTe_2$

ikifazalı və  $L+TlSmTe_2+\delta$  üçfazlı sahələrinin əmələ gəlməsinə gətirib çıxarmalıdır. Lakin temperatur intervalının olduqca kiçik olması səbəbindən üçfazlı  $L+TlSmTe_2+\delta$  sahəsi təcrübi olaraq aşkar olunmamışdır və qırıq xətlərlə göstərilmişdir (şəkil 7).

**Cədvəl 3**

**$Tl_4PbTe_3 - Tl_9BiTe_6 - Tl_9SmTe_6$  sistemi üçün DTA nəticələri, mikobərkliyin və qəfəs parametrlərinin tərkibdən asılılıqları**

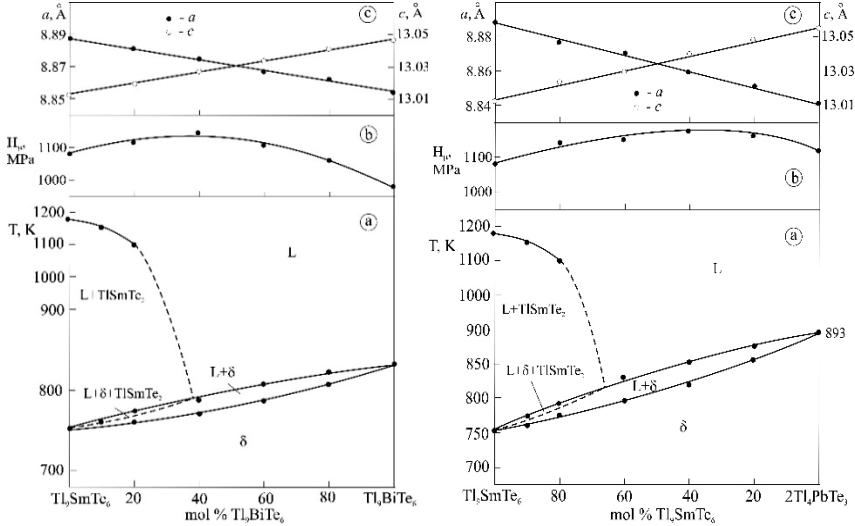
| Tərkib                         | Termiki effekt, K | Mikrobərklik, MPa | Tetraqonal qəfəs parametrləri, Å |            |
|--------------------------------|-------------------|-------------------|----------------------------------|------------|
|                                |                   |                   | <i>a</i>                         | <i>c</i>   |
| $Tl_4PbTe_3$                   | 893               | 1120              | 8.8409(5)                        | 13.0556(6) |
| $Tl_{8,2}Pb_{1,6}Sm_{0,2}Te_6$ | 845-875           | 1160              | 8.8504(4)                        | 13.0482(9) |
| $Tl_{8,4}Pb_{1,2}Sm_{0,4}Te_6$ | 820-850           | 1180              | 8.8602(5)                        | 13.0387(8) |
| $Tl_{8,5}Pb_{1,0}Sm_{0,5}Te_6$ | 817-845           | -                 | 8.8645(6)                        | 13.0343(9) |
| $Tl_{8,6}Pb_{0,8}Sm_{0,6}Te_6$ | 790-830           | 1150              | 8.8702(6)                        | 13.0298(9) |
| $Tl_{8,8}Pb_{0,4}Sm_{0,8}Te_6$ | 775-800; 1190     | 1140              | 8.8788(5)                        | 13.0280(9) |
| $Tl_{8,9}Pb_{0,2}Sm_{0,9}Te_6$ | 760-775; 1155     | -                 | -                                | -          |
| $Tl_9SmTe_6$                   | 755; 1180         | 1080              | 8.8882(5)                        | 13.0132(7) |
| $Tl_9Bi_{0,1}Sm_{0,9}Te_6$     | 760; 1150         | -                 | -                                | -          |
| $Tl_9Bi_{0,2}Sm_{0,8}Te_6$     | 765-775; 1095     | 1120              | 8.8810(4)                        | 13.0201(7) |
| $Tl_9Bi_{0,4}Sm_{0,6}Te_6$     | 770-790           | 1140              | 8.8741(5)                        | 13.0279(8) |
| $Tl_9Bi_{0,5}Sm_{0,5}Te_6$     | 780-800           | -                 | 8.8710(5)                        | 13.0301(8) |
| $Tl_9Bi_{0,6}Sm_{0,4}Te_6$     | 785-810           | 1110              | 8.8673(5)                        | 13.0340(9) |
| $Tl_9Bi_{0,8}Sm_{0,2}Te_6$     | 810-820           | 1070              | 8.8614(5)                        | 13.0410(8) |
| $Tl_9BiTe_6$                   | 830               | 980               | 8.8545(4)                        | 13.0476(7) |

$Tl_9SmTe_6$  birləşməsilə zəngin tərkib sahəsində mayedən ilkin kristallaşan fazanın məhz  $TlSmTe_2$  olması rentgenoqrafiya və SEM üsulları ilə təsdiq olunmuşdur. Bunun üçün həmin sahədən olan nümunə DTA üsulu ilə tədqiq edildikdən sonra termiki emal olunmadan onun toz difraktoqramı çəkilmiş və SEM mənzərəsi alınmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, difraktoqramda başqa fazalarla yanaşı  $TlSmTe_2$  birləşməsinə aid əksölünmə refleksləri vardır. Bu həmin tərkibli maye

məhlullardan ilkin olaraq məhz  $\text{TlSmTe}_2$  birləşməsinin kristallaşdığını sübut edir.

$\text{Tl}_4\text{PbTe}_3$ - $\text{Tl}_9\text{SmTe}_6$  və  $\text{Tl}_9\text{BiTe}_6$ - $\text{Tl}_9\text{SmTe}_6$  sistemlərinin hər ikisi üçün mikrobərqliyin tərkibdən asılılıq diaqramları yaygın maksimumdan keçən əyrilər şəklindədir (şəkil 7). Bu mənzərə fasiləsiz bərk məhlullar üçün xarakterikdir. Mikrobərqliyin qiymətinin stexiometrik birləşmə əsasında bərk məhlul əmələ gəlməsi ilə yüksəlməsi onunla izah olunur ki, əvəzləmələr zamanı (bizim hallarda  $\text{Pb} \leftrightarrow \text{Sm}$  və  $\text{Bi} \leftrightarrow \text{Sm}$  əvəzləmələri) atomların ion radiuslarının fərqli olması səbəbindən kristal qəfəsdə deformasiya baş verir və qatılığın artması ilə o güclənir. Bu isə mikrobərqliyin artmasına gətirib çıxarır.

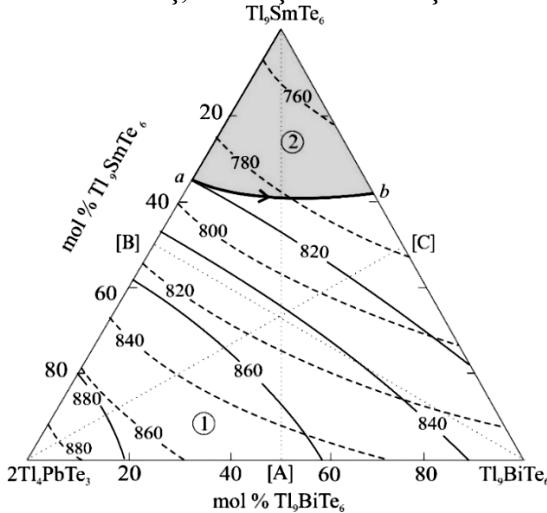
Aralıq tərkiblər ilkin birləşmələrlə keyfiyyətcə eyni difraksiya mənzərələrinə malikdirlər. Onlar  $\text{Tl}_5\text{Te}_3$ -tipli tetraqonal quruluşda kristallaşırlar və reflekslərin təmiz birləşmələrə nəzərən cüzi sürüşməsi ilə xarakterizə olunurlar. Toz difraktoqramları  $\text{Tl}_5\text{Te}_3$ -tipli tetraqonal quruluşda tam indekslənilir, hesablanmış kristal qəfəs parametrlərinin tərkibdən asılılıqları Veqard qaydasına tabedir.



**Şəkil 7.  $\text{Tl}_9\text{SmTe}_6$ - $\text{Tl}_9\text{BiTe}_6$  və  $\text{Tl}_9\text{SmTe}_6$ - $\text{Tl}_9\text{PbTe}_6$  sistemlərinin faza diaqramı (a), mikrobərqliyin (b) və kristal qəfəs parametrlərinin (c) tərkibdən asılılıqları.**

**Likvidus və solidus səthləri.** Sistemin T-x-y diaqramının likvidus səthi  $TlSmTe_2$  birləşməsinin və onunla *ab* peritektik  $L+TlSmTe_2 \leftrightarrow \delta$  tarazlıq əyrisi ilə sərhədlənən  $\delta$ -bərk məhlulların ilkin kristallaşmasına uyğun olan iki sahədən ibarətdir. Solidus isə bir səthdən ibarətdir və bu səth sistemdə subsolidusda bircinsli  $\delta$ -fazanın mövcud olmasını əks etdirir (şəkil 8).

Aldığımız təcrübi nəticələr  $Tl_4PbTe_3-Tl_9BiTe_6-Tl_9TbTe_6$  sisteminə də faza tarazlıqlarının oxşar mənzərəyə malik olmasını göstərdi. Dissertasiyada bu sistemin likvidus və solidus səthlərinin proyeksiyaları, həmçinin hər iki kvazi-üçlü sistemin faza diaqramının bir sıra izotermik, politermik kəsikləri verilmiş, ətraflı şərh olunmuşdur.



**Şəkil 8.**  $Tl_4PbTe_3-Tl_9SmTe_6-Tl_9BiTe_6$  sisteminin likvidus səthinin qatılıq üçbucağı üzərinə proyeksiyası. İlkin kristallaşma sahələri: 1- $\delta$ ; 2- $TlSmTe_2$ . Burada A, B və C – müvafiq sərhəd sistemlərinin ekvimolyar tərkibli xəlitələri. Qırıq xətlər – solidus əyriləri, nöqtəli düz xətlər – tədqiq olunmuş politermik kəsikləri.

### ***$Tl_4PbTe_3-Tl_9SmTe_6-Tl_9BiTe_6$ sisteminin faza diaqramının 3D-modelləşdirilməsi.***

Real yarımkeçirici sistemlərə tətbiq baxımından, faza tarazlıqları nəzəriyyəsinin əks məsələsinin (hal diaqramlarından termodinamik funksiyaların hesablanması) həlli daha böyük praktiki

maraq kəsb edir, çünki termodinamik xassələrin eksperimental tədqiqi templəri faza tarazlıqlarının tədqiqindən xeyli aşağıdır.

Bu məsələnin termodinamik cəhətdən korrekt həlli üçün faza diaqramlarından əlavə fazaların xassələri haqqında bu və ya digər məlumat tələb olunur. Tələb olunan minimal ilkin məlumat toplularına uyğun düzgün həllərin mümkün variantları G.F.Voronin tərəfindən araşdırılmışdır.

Əksər real sistemlər üçün termodinamik cəhətdən korrekt həll üsullarının həyata keçirilməsi üçün lazımi minimum məlumatlar mövcud olmur. Buna görə də faza diaqramlarında toplanmış termodinamik məlumatı əldə etmək üçün daha çox təqribi üsullardan istifadə olunur. Ən çox istifadə edilən üsullar müxtəlif model təsəvvürlərinə əsaslanır ki, bu da çox məhdud ilkin məlumatlarla hesablamalar aparmağa imkan verir. Bu yanaşmanın əsas çatışmazlığı ondan ibarətdir ki, termodinamika çərçivəsində qəbul edilmiş modelin reallığa uyğunluq dərəcəsini aprior müəyyən etmək mümkün deyil. Buna görə də, bu cür qiymətləndirmələrdə həmişə faza modelinin qeyri-adekvatlığı ilə bağlı naməlum xəta olur, yəni onlar termodinamik cəhətdən qeyri-korrektirlər. Bununla belə qeyd edildiyi kimi, seçilmiş modelin reallığa yaxın olmasını təmin etdikdə, belə yanaşmadan istifadə etmək mümkündür.

Üçlü və ya kvaziüçlü sistemlərin həcmi T-x-y diaqramlarının üçölçümlü (3D) kompüter modelinin qurulmasının əsas prinsipi onun faza tarazlıqları səthlərinin və faza sahələrinin üçölçümlü mənzərələrinin qurulmasıdır. T-x-y diaqramlarının 3D kompüter modellərindən istifadə tədqiq olunan sistemlərin həndəsi strukturunun müxtəlif variantlarını nəzərə almağa imkan verir. 3D modelləşdirmə səthlərin sayını və növünü (xətti və ya qeyri-xətti səthlər, müstəvi, künbəz və s.), faza sahələrinin sayını, üçfazlı sahələrdə hansı bərk fazaların sabit və ya dəyişən tərkibli olmasını müəyyən etməyə, cədvəl məlumatlarını üçölçümlü mənzərələrə çevirməyə və yekun olaraq T-x-y diaqramının həndəsi modelini qurmağa imkan verir.

$2\text{Tl}_4\text{PbTe}_3\text{-Tl}_9\text{BiTe}_6\text{-Tl}_9\text{SmTe}_6$  və  $2\text{Tl}_4\text{PbTe}_3\text{-Tl}_9\text{BiTe}_6\text{-Tl}_9\text{TbTe}_6$  sistemlərinin üçölçümlü likvidus səthlərini vizuallaşdırmaq üçün işdə OriginLab proqramının analitik variantından istifadə edilmişdir.

$\text{Tl}_4\text{PbTe}_3\text{-Tl}_9\text{BiTe}_6\text{-Tl}_9\text{SmTe}_6$  sisteminin faza diaqramının 3 D

modelləşdirilməsi üçün əvvəlcə onun  $Tl_9SmTe_6$  (1) -  $2Tl_4PbTe_3$  (2),  $Tl_9SmTe_6$  (1) -  $Tl_9BiTe_6$  (3) və  $2Tl_4PbTe_3$  (2) -  $Tl_9BiTe_6$  (3) sərhəd sistemlərinin likvidus və solidus əyrilərinin analitik ifadələri alınmışdır.

Bunun üçün heterogen sahələrdə tarazlıqda olan fazaların tərkibləri üçün qeyri-səlis mövqelər istifadə edilmişdir<sup>4</sup>.

1-2 və 1-3 sistemlərinin likvidus və solidus temperaturlarının tərkibdən monoton asılılığı səbəbindən onlar üçün aşağıdakı tənliklərdən istifadə olunmuşdur:

$$T(\text{likvidus}) = a + bx + (c \pm \Delta)x(1-x)$$

$$T(\text{solidus}) = a + bx + (d \pm \Delta)x(1-x)$$

2-3 sistemində likvidus və solidus temperaturlarının tərkibdən mürəkkəb asılılığını nəzərə alaraq onun üçün

$$T(\text{likvidus}) = a + bx + (c_0 + c_1x + c_2x^2)x(1-x)$$

$$T(\text{solidus}) = a + bx + (d_0 + d_1x + d_2x^2 + d_3x^3)x(1-x)$$

tənliklərindən istifadə edilmişdir. Burada  $a$  və  $b$  əmsalları  $Tl_9SmTe_6$ ,  $Tl_4PbTe_3$  və  $Tl_9BiTe_6$  birləşmələrinin ərimə temperaturlarına əsasən müəyyən edilir,  $c$  və  $d$  əmsalları təcrübi xətalarla əlaqədardır.  $Tl_9SmTe_6$ (1)- $2Tl_4PbTe_3$ (2)- $Tl_9BiTe_6$ (3) üçlü sistemin likvidus və solidus səthləri üçün isə aşağıdakı tənliklərdən istifadə olunmuşdur:

$$T(\text{likvidus}) = yT_{\text{liq}}(1-2) + (1-y)T_{\text{liq}}(1-3) + T_{\text{liq}}(2-3)y(1-y)(1-x)$$

$$T(\text{solidus}) = yT_{\text{sol}}(1-2) + (1-y)T_{\text{sol}}(1-3) + T_{\text{sol}}(2-3) + by(1-y)(1-x)^2$$

Yuxarıdakı ifadələrdə  $x$  –  $Tl_9SmTe_6$  birləşməsinin mol hisəsi;  $y = x_2 / (1-x)$ ;  $(1-y) = x_3 / (1-x)$ ;  $x_2, x_3$ - müvafiq olaraq  $Tl_4PbTe_3$  və  $Tl_9BiTe_6$  birləşmələrinin mol hissələridir.

Sərhəd sistemlərində əmələ gələn bərk məhlulların əmələgəlmə sərbəst enerjisini hesablamaq üçün assosiasiya olunmuş requlyar məhlul modelinin asimmetrik versiyasından istifadə edilmişdir:

$$\Delta G_T^0 = (a + bT)x^m (1-x)^n + RT[p_x \ln x + q(1-x) \ln(1-x)]$$

Burada birinci hədd requlyar məhlullar modelinin asimmetrik versiyasında bərk məhlulların qarışma entalpiyasını göstərir. Qeyri-

<sup>4</sup> Mammadov, A.N., Aliev, Z.S., Babanly, M.B. Study of the Uncertainty Heterogeneous Phase Equilibria Areas in the Binary YbTe-SnTe Alloy System. // 13<sup>th</sup> International Conference on Theory and Application of Fuzzy Systems and Soft Computing (ICAFS 2018). Advances in Intelligent Systems and Computing, - Springer, Cham, - 2019, - vol. 896, - p. 815-822

məhdud bərk məhlullar üçün qarışma parametri  $a < 0$ ,  $b > 0$ ; ikinci hədd qeyri-molekulyar birləşmələr modelinə görə bərk məhlulların qarışma konfigurasiya entropiyasıdır;  $p$  və  $q$  birləşmələrdəki müxtəlif atomların sayını göstərir;  $R = 8.314 \text{ C} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ .

Likvidus və solidus əyrilərinin optimallaşdırılması çoxməqsədli genetik alqoritmdən (ÇGA) istifadə etməklə aşağıdakı sxem üzrə aparılmışdır<sup>5</sup>: əvvəlcə ÇGA üçün DTA nəticələri əsasında hər bir parametrlər üçün axtarış diapazonu müəyyən edilmişdir. Sonra dəyişənlərin qiymətlərini variasiya etməklə onların formallaşdırdığı likvidus və solidusun təcrübəyə ən yaxşı uyğunluğu təmin edilmişdir. Qeyri-səlis məntiq qiymətləndirilməsi sxemi müəyyən üzvün bütün mümkün qiymətlərinə baxır və onları 0 ilə 1 arasındakı qiymətə dəyişilir. Ən pis yanaşmada qiymət sıfır, ən yaxşıda birə bərabər olur. Qeyri-səlis məntiq sxemindən istifadə edərək, bütün üzvlər üçün 1-ə uyğunluq səviyyəsinə və ya ona daha yaxın mövqeyə çatana qədər optimallaşdırma aparılır. Bu vəziyyətə çatdıqda, model parametrləri üzrə qeyri-müəyyənlik sərhədlərini müəyyən etmək üçün alınmış son topludan istifadə olunur.

Sərhəd sistemlərin likvidus və solidus əyriləri üçün aşağıdakı analitik asılılıqlar alınmışdır:

### **2Tl<sub>4</sub>PbTe<sub>3</sub>- Tl<sub>9</sub>SmTe<sub>6</sub> sistemi üçün**

- 1)  $T(\text{liq}) = 893 - 138 \cdot x + 70 \cdot x^2(1-x)$ ;    2)  $T(\text{liq}) = 893 - 138 \cdot x + 56 \cdot x^2(1-x)$ ;
- 3)  $T(\text{liq}) = 893 - 138 \cdot x + 44 \cdot x^2(1-x)$ ;    4)  $T(\text{sol}) = 893 - 138 \cdot x - 52 \cdot x^2(1-x)$ ;
- 5)  $T(\text{sol}) = 893 - 138 \cdot x - 62 \cdot x^2(1-x)$ ;    6)  $T(\text{sol}) = 893 - 138 \cdot x - 70 \cdot x^2(1-x)$ .

### **Tl<sub>9</sub>BiTe<sub>6</sub> – Tl<sub>9</sub>SmTe<sub>6</sub> sistemi üçün**

- 1)  $T(\text{liq}) = 830 - 75 \cdot x + 52 \cdot x^2(1-x)$ ;    2)  $T(\text{liq}) = 830 - 75 \cdot x + 45 \cdot x^2(1-x)$
- 3)  $T(\text{liq}) = 830 - 75 \cdot x + 39 \cdot x^2(1-x)$ ;    4)  $T(\text{sol}) = 830 - 75 \cdot x - 43 \cdot x^2(1-x)$ ;
- 5)  $T(\text{sol}) = 830 - 75 \cdot x - 50 \cdot x^2(1-x)$ ;    6)  $T(\text{sol}) = 830 - 75 \cdot x - 57 \cdot x^2(1-x)$ .

### **Tl<sub>9</sub>BiTe<sub>6</sub> -2Tl<sub>4</sub>PbTe<sub>3</sub> sistemi üçün**

- 1)  $T(\text{liq}) = 830 + 63 \cdot x + x^2(1-x) \cdot (46.7 - 100.7 \cdot x + 80.4 \cdot x^2)$ ;
- 2)  $T(\text{liq}) = 830 + 63 \cdot x + x^2(1-x) \cdot (46.7120.7 \cdot x + 98.4 \cdot x^2)$ ;
- 3)  $T(\text{liq}) = 830 + 63 \cdot x + x^2(1-x) \cdot (42.7 - 130 \cdot x + 98.4 \cdot x^2)$ ,
- 4)  $T(\text{sol}) = 830 + 63 \cdot x + x^2(1-x) \cdot (-45 + 68 \cdot x - 184 \cdot x^2 + 125 \cdot x^3)$ ;

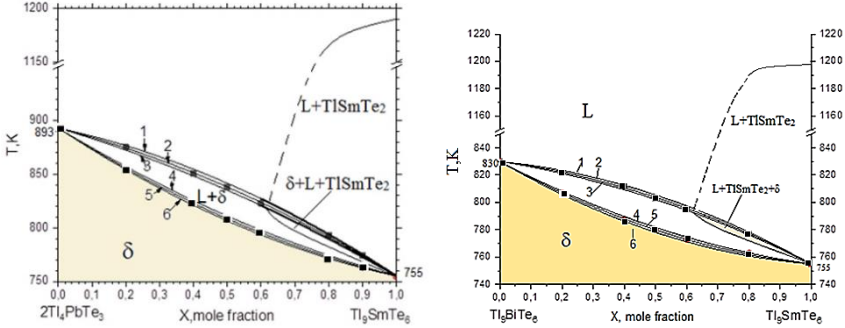
<sup>5</sup> Mamedov, A.N. Thermodynamics of systems with non-molecular compounds / A.N.Mamedov. - LAP Germany, - 2015. - 124 p



$$5) T(\text{sol}) = 830 + 63 * x + x * (1-x) * (-55 + 68 * x - 184 * x^2 + 125 * x^3);$$

$$6) T(\text{sol}) = 830 + 63 * x + x * (1-x) * (-65 + 68 * x - 184 * x^2 + 125 * x^3)$$

Bu tənliklər əsasında hər üç kəşik üzrə likvidus və solidus əyriləri qurulmuşdur.  $2\text{Tl}_4\text{PbTe}_3\text{-Tl}_9\text{SmTe}_6$  və  $\text{Tl}_9\text{BiTe}_6\text{-Tl}_9\text{SmTe}_6$  sistemlərinin likvidus və solidus əyriləri şəkil 9-da verilir. Göründüyü kimi müxtəlif ifadələr üzrə hesablanmış likvidus və solidus əyriləri bir-birilə və təcrübə nəticələrlə yaxşı uyğunluq təşkil edir.



**Şəkil 9.  $2\text{Tl}_4\text{PbTe}_3\text{-Tl}_9\text{SmTe}_6$  və  $\text{Tl}_9\text{BiTe}_6\text{-Tl}_9\text{SmTe}_6$  sistemlərinin likvidus və solidus əyriləri. Xətlər –hesablama, kvadratlar – təcrübə.**

$\text{Tl}_4\text{PbTe}_3\text{-Tl}_9\text{SmTe}_6\text{-Tl}_9\text{BiTe}_6$  sisteminin likvidus və solidus səthlərinin modelləşdirilməsi üçün aşağıdakı riyazi ifadələr alınmış və onlar əsasnda faza diaqramının 3D görüntüsü əldə olunmuşdur (şəkil 10).

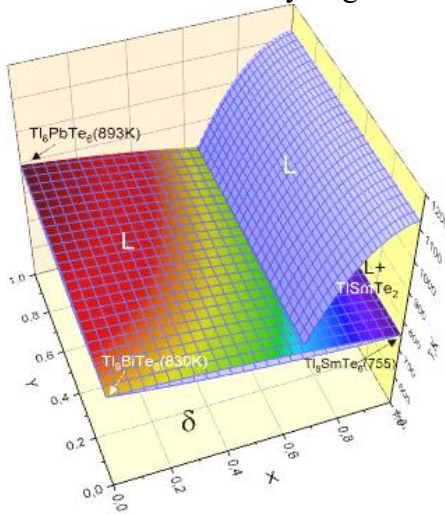
$$T(\text{TlSmTe}_2 \text{ birləşməsinin likvidusu}) = (-1248 + 4673 * x - 2300 * x^2) * y + (-1248 + 4673 * x - 2300 * x^2) * (1-y)$$

$$T(\text{bərk məhlulların likvidusu}) = y * T_{\text{liq}}(1-2) + (1-y) * T_{\text{liq}}(1-3) + ay * (1-y) * (1-x_1) = (893 - 138 * x + 56 * x * (1-x)) * y + (830 - 75 * x + 45 * x * (1-x)) * (1-y) + 40 * y * (1-y) * (1-x),$$

$$T(\text{solidus}) = y * T_{\text{sol}}(1-2) + (1-y) * T_{\text{sol}}(1-3) + by * (1-y) * (1-x)^2 = (893 - 138 * x - 62 * x * (1-x)) * y + (830 - 75 * x - 50 * x * (1-x)) * (1-y) + 44 * y * (1-y) * (1-x)^2$$

Hesablamalar nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, 300–900 K temperatur intervalında qarışma Gibbs sərbəst enerjisinin ikinci tərtib törəməsi sıfırdan böyükdür. Ona görə də bütün tərkib intervalında

funksiyanın dayanıqlıq dərəcəsi ( $\Psi > 0$ ) də sıfırdan böyükdür. Bu isə bərk məhlulların termodinamik stabilliyini göstərir.



**Şəkil 10.  $Tl_8PbTe_3$  -  $Tl_9BiTe_6$  -  $Tl_9SmTe_6$  sisteminin 3D vizuallaşdırılmış modeli**

Eyni qayda ilə  $Tl_8PbTe_3$ - $Tl_9BiTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$  sisteminin 3 D termodinamik modelləşdirilməsi aparılmışdır.

Beləliklə, baxılan hər iki kvaziüçlü sistemin faza diaqramının 3 D modelləşdirilməsi və termodinamik analizi təcrübi nəticələrlə yaxşı uyğun gəlir və göstərir ki,  $Tl_5Te_3$  birləşməsinin quruluş analoqları olan üçlü birləşmələrdən təşkil olunmuş mürəkkəb sistemlər termodinamik stabil qeyri-məhdud bərk məhlulların əmələ gəlməsi ilə səciyyələnir və bu sistemlərdə əmələ gələn maye və bərk məhlullar assosiasiya olunmuş requlyar məhlul hesab edilə bilər.

## NƏTİCƏLƏR

1. DTA, RFA, SEM və mikrobərkiliyin ölçülməsi üsulları ilə  $Tl$ - $B^V$ - $Tb$ - $Te$  ( $B^V$ - $Sb$ ,  $Bi$ ) sistemlərinin  $Tl_2Te$ - $TlB^VTe_2$ - $TlTbTe_2$  qatılıq sahələrində fiziki-kimyəvi qarşılıqlı təsir xarakteri müəyyən edilmiş, hər iki tərkib müstəvisi üzrə bərkfaza tarazlıqları diaqramları və bir sıra "tərkib-xassə" diaqramları qurulmuşdur. Göstərilmişdir ki, hər iki sistem bütövlükdə qeyri-kvaziüçlü olsa da subsolidusda stabildir.

Fasiləsiz bərk məhlullar gətirən  $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9B^VTe_6$  daxili kəsikləri bu sistemləri iki müstəqil alt sistemə bölür:  $Tl_2Te$ - $Tl_9B^VTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$  və  $Tl_9B^VTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$ .

- $Tl_2Te$ - $Tl_9B^VTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$  alt sistemləri üzrə faza tarazlıqlarının T-x-y koordinatlarında tam mənzərələri alınmışdır. Hər iki sistemin likvidus və solidus səthlərinin proyeksiyaları, faza diaqramlarının bir sıra politermik və izotermik kəsikləri qurulmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, likvidus səthləri  $Tl_9B^VTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$  kəsikləri üzrə fasiləsiz bərk məhlulların ( $\delta$ -faza), həmçinin  $Tl_2Te$  və  $Tl_9TbTe_6$  birləşmələri əsasında fazaların ilkin kristallaşmasını əks etdirən 3 sahədən ibarətdir, solidus səthləri isə ilk iki fazaya aid 2 səthdən ibarətdir.  $\delta$ -fazanın homogenlik sahəsi qatılıq üçbucağı daxilinə kəskin nüfuz edərək onun sahəsinin 90%-ə qədər hissəsini əhatə edir.
- $Tl_9B^VTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$  alt sistemlərində  $Tl_9B^VTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$  yan tərəfləri üzrə əmələ gələn fasiləsiz bərk məhlullar ( $\delta$ -faza)  $Tl_9TbTe_6$  və  $Tl_9B^VTe_6$  birləşmələri əsasında geniş bərk məhlul sahələri ilə ( $\beta_1$  və  $\beta_2$ ) qarşılıqlı təsirdə olub,  $\beta_1+\delta$  və  $\beta_2+\delta$  və  $\beta_1+\beta_2+\delta$  heterogen sahələri əmələ gətirir. Müxtəlif fiziki-kimyəvi metodlarla  $\beta_1$ - və  $\beta_2$ -fazaların homogenlik sahələri, həmçinin göstərilən heterogen sahələrin sərhədləri təyin edilmişdir.
- Müvafiq beşkomponentli sistemlərin  $Tl_4PbTe_3$ - $Tl_9BiTe_6$ - $Tl_9SmTe_6$  və  $Tl_4PbTe_3$ - $Tl_9BiTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$  qatılıq müstəviləri üzrə faza tarazlıqlarına aid yeni qarşılıqlı tənzimlənmiş nəticələr kompleksləri alınmışdır. Hər iki alt sistemin T-x-y diaqramının bir sıra şaquli və üfqi kəsikləri, həmçinin likvidus və solidus səthlərinin qatılıq müstəviləri üzərinə proyeksiyaları qurulmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, likvidus səthi  $\delta$ -fazanın və  $TlLnTe_2$  ( $Ln$ -Sm, Tb) əsasında fazanın ilkin kristallaşma sahələrindən, solidus isə  $\delta$ -fazaya aid bir səthdən ibarətdir. Hər iki alt sistem  $Tl_9SmTe_6$  və  $Tl_9TbTe_6$  birləşmələrinin inkonqruent əriməsi səbəbindən qeyri-kvaziüçlü olsa da, sub-solidusda stabildir və  $Tl_5Te_3$  tipli tetraqonal qəfəsdə kristallaşan fasiləsiz bərk məhlul seriyaları əmələ gətirir.
- Assosiasiya olunmuş requlyar məhlul yanaşmasına əsaslanmaqla  $Tl_4PbTe_3$ - $Tl_9BiTe_6$ - $Tl_9SmTe_6$  və  $Tl_4PbTe_3$ - $Tl_9BiTe_6$ - $Tl_9TbTe_6$  sis-

temlərində fazaların likvidus və solidus səthlərinin analitik tənlikləri alınmış, onların 3D modelləri yaradılmış və vizuallaşdırılmışdır. Bu modellər əsasında faza diaqramlarının termodinamik analizi həyata keçirilmiş, həm maye, həm də bərk məhlulların assosiasiya olunmuş reqlulyar məhlul modelinə uyğunluğu göstərilmişdir.

6. Tədqiq edilən dörd- və beşkomponentli sistemlərdə faza tarazlıqlarına aid alınmış nəticələr əsasında, onlarda aşkar edilmiş yeni dəyişən tərkibli fazaların verilmiş tərkibli seçmə nümunələri fərdi şəkildə sintez olunmuş və xarakterizə edilmişlər. Həmin nümunələrin ərintidən kristallaşma xarakteri və temperatur intervalları, həmçinin kristalloqrafik parametrləri təyin edilmişdir. Aşkar edilmiş yeni bərk məhlullar tənzimləmə bilən tərkibə və funksional xassələrə malik potensial maqnetik topoloji izolyatorlar və termoelektrik materialları kimi maraq kəsb edir.

**Dissertasiyanın əsas nəticələri aşağıdakı elmi əsərlərdə çap olunmuşdur.**

1. Alakbarzade, G.I.  $Tl_4PbTe_3-Tl_9SmTe_6$  system / G.I.Alakbarzade, D.M.Babanly, S.Z.Imamaliyeva // Condensed Matter and Interphases, - 2017. 19 (4), - c. 474-478.
2. Alakbarzade, G.I., Mehdiyeva, I.F., Mirzoyeva, R.J., Imamaliyeva, S.Z. Phase formation in  $Tl_4PbTe_3-Tl_9BiTe_6-Tl_9LnTe_6$  (Ln-Sm, Tm) systems and some properties of solid solutions // 3<sup>rd</sup> International Turkic World Conference on Chemical Sciences and Technologies, - Baku, - 2017, - p. 259.
3. Imamaliyeva, S.Z. Phase equilibria in the  $Tl_4PbTe_3-Tl_9SmTe_6-Tl_9BiTe_6$  section of the Tl-Pb-Bi-Sm-Te system / S.Z.Imamaliyeva, G.I.Alakbarzade, M.A.Mahmudova [et al.] // Acta Chimica Slovenica, - 2018. vol.65, - p. 365–371.
4. Imamaliyeva, S.Z. Experimental study of the  $Tl_4PbTe_3-Tl_9TbTe_6-Tl_9BiTe_6$  section of the Tl-Pb-Bi-Tb-Te system / S.Z.Imamaliyeva, G.I.Alakbarzade, M.A.Mahmudova [et al.] // Materials Research, - 2018. 21 (4), - p. 20180189.
5. Imamaliyeva, S.Z.  $Tl_2Te-Tl_9SbTe_6-Tl_9TbTe_6$  system / S.Z.Imamaliyeva, G.I.Alakbarzade, K.N.Babanly [et al.] // New Materials,

- Compounds and Applications, - 2018. 2 (3), - p. 221-230.
6. Алекберзаде, Г.И., Имамалиева, С.З., Салимов, З.Э., Бабанлы, М.Б. Физико-химическое исследование систем  $Tl_4PbTe_3-Tl_9LnTe_6-Tl_9BiTe_6$  (Ln-Sm, Gd, Tb) // "Высокочистые вещества и материалы. Получение, анализ, применение" XVI всероссийская конф. и IX школа молодых ученых, посв. 100-летию Г.Г.Девярых, - Новгород, - 2018, - с. 22.
  7. Алекберзаде, Г.И., Исмаилова, К.Г., Салимов, З.Э., Имамалиева, С.З. Получение и физико-химическое исследование новых теллуридных фаз в системе  $Tl_4PbTe_3-Tl_9LnTe_6-Tl_9BiTe_6$  // II international scientific conference of young researchers dedicated to the 95<sup>th</sup> Anniversary of the National leader of Azerbaijan, Heydar Aliyev, - Baku, - 2018, - p.158-159.
  8. Алекберзаде, Г.И., Имамалиева, С.З., Бабанлы, М.Б. Новые фазы переменного состава – потенциальные термоэлектрические материалы в системах  $Tl_4PbTe_3-Tl_9BiTe_6-Tl_9Sm(Tb)Te_6$  // Всероссийская конференция с международным участием "Химия твердого тела и функциональные материалы" и XII всероссийский симпозиум с межд. участием "Термодинамика и материаловедение", - Санкт-Петербург, - 2018, - с. 155.
  9. Alakbarzade, G.I. Solid-phase equilibria in the  $TlBiTe_2-TlTbTe_2$  system // Chemical Problems, - 2019. 4 (17), - p. 565-571.
  10. Alakbarzade, G.I. Rentgenographic investigation of solid-phase equilibria in the  $TlSbTe_2-TlTbTe_2$  system // Azerbaijan Chemical Journal., - 2019. №3, - p. 84-87.
  11. Alakbarzade, G.I., Imamaliyeva, S.Z., Shukurova, G.M., Babanly, M.B. Solid-phase equilibria in the  $TlBi(Sb)Te_2-TlTbTe_2$  systems // 5<sup>th</sup> International Turkic World Conference on Chemical Sciences and Technologies (ITWCCST 2019), - Sakarya, - 2019, - p. 136.
  12. Ələkbərzadə, Q.İ., Şükürova, Q.M., Mirzəyeva, R.C., İmaməliyeva, S.Z.  $TlSbTe_2-TlTbTe_2$  sistemində bərk faza tarazlıqları // Müasir təbiət və iqtisad elmlərinin aktual problemləri, - Gəncə, - 2019. - s. 31-33.
  13. Imamaliyeva, S.Z. Solid-phase equilibria diagram of the  $Tl_2Te-TlTbTe_2-TlSbTe_2$  system / S.Z.Imamaliyeva, G.I.Alakbarzade,

- V.A.Gasymov [et al.] // New Materials, Compounds and Applications, - 2020. 4 (2), - p. 99-107.
14. Imamaliyeva S.Z. Modeling the phase diagrams of the  $Tl_9SmTe_6 - Tl_4PbTe_3$  and  $Tl_9SmTe_6 - Tl_9BiTe_6$  systems / S.Z.Imamaliyeva, G.I.Alakbarzade, A.N.Mamedov [et al]. // Azerbaijan Chemical Journal, - 2020. №4, - p. 12-16.
  15. Imamaliyeva, S.Z. Phase relations in the  $Tl_2Te-TlBiTe_2-TlTbTe_2$  system / S.Z. Imamaliyeva, G.I.Alakbarzade, D.M.Babanly [et al] // Condensed Matter and Interphases, - 2021. 23 (1), - p. 32-40.
  16. Imamaliyeva, S.Z., Alekberzade, G.I., Mamedov, A.N., Tagiev, D.B., Babanly, M.B. Modeling the phase diagram of the  $Tl_9SmTe_6 - Tl_4PbTe_3 - Tl_9BiTe_6$  system // 14<sup>th</sup> International Conference on Theory and Application of Fuzzy Systems and Soft Computing (ICAFS 2020). Advances in Intelligent Systems and Computing, - Springer, Cham, - 2021. vol.1306, - p. 480-489.
  17. Imamaliyeva, S.Z. Modeling the phase diagram of the  $Tl_9TbTe_6 - Tl_4PbTe_3 - Tl_9BiTe_6$  system / S.Z.Imamaliyeva, G.I.Alakbarzade, A.N.Mamedov [et al] // Azerbaijan Chemical Journal, - 2021. №2, - p. 6-12.



Dissertasiyanın müdafiəsi 29 noyabr 2024-cü il tarixində saat 11<sup>00</sup> Bakı Dövlət Universitetində fəalliyət göstərən ED 2.16 Dissertasiya Şurasının iclasında keçiriləcək.

Ünvan: AZ 1148, Bakı şəhəri, Z.Xəlilov küç, 23.

Dissertasiya ilə Bakı Dövlət Universitetinin kitabxanasında tanış olmaq mümkündür.

Dissertasiya və avtoreferatın elektron versiyaları [www.kqkiamea.az](http://www.kqkiamea.az) rəsmi internet saytında yerləşdirilmişdir.

Avtoreferat 24 oktyabr 2024-cü il tarixində zəruri ünvanlara göndərilmişdir.

Çapa imzalanıb: 04.10.2024

Kağızın formatı: 60x84<sup>1/16</sup>

Həcm: 39222 işarə

Tiraj: 100 nüsxə