

Годжаєв Є.М., Абдурахманова У.С.



Годжаєв Є.М.

Азербайджанський технічний університет
просп. Гусейн Джавіда, 25, Баку,
AZ 1073, Азербайджан



Абдурахманова У.С.

ФАЗОВИЙ АНАЛІЗ І ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ $InGaTe_2$

У роботі подано результати дослідження температурних залежностей питомої електропровідності, коефіцієнтів термоЕРС і теплопровідності в інтервалі температур 300-900 К сполуки $InGaTe_2$, розрахунки концентрації, холлівської рухливості носіїв струму й термоелектричної ефективності цієї сполуки. На основі зонної структури даної фази теоретично обчислені параметри елементарної ґратки, ефективні маси електронів і дірок і виявлено, що величини параметрів елементарної ґратки добре узгоджуються з експериментальними даними.

Ключові слова: сполуки $InGaTe_2$, зонна структура, ефективна маса, параметри елементарної ґратки, термоелектрична ефективність.

This paper presents the results of research on the temperature dependences of the electric conductivity, the Seebeck coefficient and the thermal conductivity in the temperature range of 300 to 900 K, and the results of calculation of the concentration, the Hall mobility of current carriers and the thermoelectric figure of merit of $InGaTe_2$ semiconductor compound. Based on the band structure of this phase, the unit cell parameters, the electron and hole effective masses have been calculated and it has been established that the unit cell parameters are in good agreement with the experimental data.

Key words: $InGaTe_2$ compounds, band structure, effective mass, unit cell parameters, thermoelectric figure of merit.

Вступ

Відомо, що пошук нових напівпровідникових матеріалів, зазвичай, ведеться в напрямку розширення кристалоструктурної групи вже відомих матеріалів.

Зокрема, розшифруванням кристалічної структури $TlSe$ виявлено, що дана фаза відрізняється крайніми специфічними особливостями. ґратка $TlSe$ виявляється складеною із двох самостійних структурних одиниць- з октаєдрів з іонним характером зв'язку $Tl^{1+}-Se$ і тетраедра з ковалентним зв'язком $Tl^{3+}-Se$ і отже, хімічну формулу $TlSe$ слід написати як $Tl^+Tl^{3+}Se_2$ [1-3]. У наступних роботах [4,5] заміщенням тривалентного атома талію атомами індію й галію в ґратках типу $TlSe$ отриманий новий клас напівпровідникових сполук типу $A^{III}B^{III}X_2^{VI}$.

Рентгеноструктурними дослідженнями виявлено, що частина цих сполук має ланцюжкову, а інша частина шарувату структуру. Сполуки з ланцюжковою структурою кристалізуються в тетрагональній сингонії, просторова група D_{4h}^{18} (I4/mcm) [2,3].

Існування сполук вищевказаного типу є реальністю й з погляду електронної будови

складових атомів. При утворенні сполук типу $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ зовнішні електронні оболонки двох атомів халькогена з електронною оболонкою $2(s^2p^4)$ за рахунок одного ($6p^1$) електрона одновалентного талію (або індію) і одного ($5s^2p^1$) тривалентного індію (або галію) добудовуються до стійкої $2(s^2p^6)$ конфігурації.

У роботах [3,4] експериментально доведено, що атоми Tl при взаємодії навіть з елементами своєї підгрупи (In, Ga) виявляють одновалентний стан із зовнішньою $6s^26p^1$ електронною конфігурацією. Одновалентний стан характерний також для елементів індію й галію, проте ці елементи у конкуренції з талієм виявляють нормальну валентність із зовнішньою конфігурацією електронів $5s^25p^1$ і $4s^24p^1$ відповідно.

Реальність даного припущення впливає з того факту, що $5s^2$ оболонки індію й $4s^2$ оболонки галію в порівнянні з $6s^2$ оболонкою талію менш стійкі, тобто ймовірність прояву одновалентного стану, а отже й зайняття ними октаедричного положення в ґратках типу $TlSe$ за інших рівних умов зменшується в послідовності $Tl \rightarrow In \rightarrow Ga$. Таким чином, сполуки $TlInX_2^{VI}$, $TlGaX_2^{VI}$ і $InGaX_2^{VI}$ при наявності їх ізоструктурності відрізняються відповідними аніонними радикалами $[Tl^+X_2^{VI}]$, $[In^{3+}X_2^{VI}]$ і $[Ga^{3+}X_2^{VI}]$ і шириною забороненої зони [4].

Існування потрійних сполук типу $A^{III}B^{III}X_2^{VI}$ були підтверджені методами диференційно-термічного, мікроструктурного й рентгенофазового аналізів [6-9]. У наступних роботах досліджувалися їхні електрофізичні, теплові, оптичні й фотоелектричні властивості й виявлено, що ці сполуки мають високі коефіцієнти фото - й тензочутливості, мають перемикаючі властивості з пам'яттю [11-13], телуриди і їх тверді розчини мають високу термоелектричну ефективність [14-17]. Досліджувався енергетичний спектр сполук $TlInSe_2(Te_2)$ $TlGaSe_2(Te_2)$ [22-25], розраховані їхні оптичні функції, визначені походження валентної зони й зони провідності, ширина забороненої зони, ефективні маси електронів і дірок, параметри елементарної ґратки. Однак, дані по дослідженню сполук $InGaSe_2(Te_2)$ незначні, незважаючи на те, що про існування цих сполук повідомлялося ще в середині минулого століття [4]. У наступних роботах [4, 5] досліджувалися їхні деякі електрофізичні властивості. У роботі [10] вирощені досконалі монокристали $InGaTe_2$, рентгенофазовим аналізом визначені параметри елементарних ґраток і виявлено, що $InGaTe_2$ так само як і його інші структурні аналоги кристалізується в тетрагональній сингонії. Там же розраховані енергетичні спектри, визначені ширина забороненої зони, походження валентної зони й зони провідності. Досліджувалися спектр фотолюмінесценції й фотоелектричні властивості, розрахована електронна структура $InGaTe_2$ й виявлено, що отримані дані перебувають в узгодженні з даними [22], де розшифрована зонна структура даної фази. А в роботі [23] обчислені оптичні функції $InGaTe_2$. Однак, дані по дослідженню температурних залежностей електричних і теплових властивостей, результати розрахунків параметрів елементарних ґраток, ефективних мас електронів і дірок $InGaTe_2$ відсутні. Метою даної роботи є дослідження електрофізичних властивостей, розрахунки ефективних мас електронів і дірок і параметрів елементарних ґраток $InGaTe_2$.

Експериментальна частина

Електропровідність (σ), коефіцієнти Холла (R), термоЕРС (α) і теплопровідність (χ_T) вимірювали за методикою, описаною в [24]. Похибки вимірювання σ , R , α і χ становили 5, 6, 7 і 4%, відповідно.

Сполуку $InGaTe_2$ синтезували сплавленням вихідних компонентів, узятих в стехіометричному співвідношенні в відкачаних до 0.0133 Па й запаяних кварцових ампулах.

Для синтезу $InGaTe_2$ використовували елементи чистотою In - 000, Ga - 99.996, Te - 99.997%. Ампули спершу очищалися розчином HF з дистильованою водою. Після хімічного очищення вакуумовані до 0.0133 Па ампули поміщали в піч при $1000^{\circ}C$ на 24 години, після чого охолоджували, наповнювали високоочищеними елементами. Для гомогенізації сплаву суміш витримувалася 24 години при температурі $970^{\circ}C$. Під час процесу синтезу ампули часто струшували з метою кращого змішування складових частин. Далі ампула з речовиною зі швидкістю 1.33 мм у годину переміщалася з високотемпературної зони в зону кристалізації з відповідною температурою $700^{\circ}C$. Після охолодження до кімнатної температури отримані кристали піддавали рентгенофазовому аналізу. Результати рентгенофазового аналізу наведені в табл. 1.

Таблиця 1

Результати рентгенофазового аналізу $InGaTe_2$

θ	$d_{розр}^0, \text{Å}$	$d_{екс}^0, \text{Å}$	hkl	$I_{відн.}$
10031`	4.2300	4.2217	200	6
13042`	3.2600	3.2554	211	100
22026`	2.9911	2.020	220	14
2301`	1.9685	1.9661	411	33
23022`	1.9439	1.9442	332(402)	29
24039`	1,8770	1.8662	420	18
25012`	1,8102	1.8111	421	11
27020`	1.6788	1.6784	340(500)	22
30046`	1.5072	1.5140	502	10
32049`	1.4227	1.4192	522	9

Рентгенофазовий аналіз показав, що сполука $InGaTe_2$ кристалізується в тетрагональній сингонії з параметрами ґратки $a=8,463 \text{ Å}$, $c=6,981 \text{ Å}$. Ці величини добре узгоджуються з даними [10] $a= 8,412 \text{ Å}$, $c= 6,875 \text{ Å}$.

Результати і їх обговорення

Результати дослідження температурних залежностей електропровідності, коефіцієнтів Холла, термоЕРС і теплопровідності, обчислені значення холлівської рухливості, концентрації вільних носіїв струму й коефіцієнта термоелектричної ефективності сполуки $InGaTe_2$ наведені в таблиці й на рисунках 1-3. Як випливає з рис. 1а, питома електропровідність зі збільшенням температури від кімнатної до 400 К відносно слабка, а з настанням власної провідності власні носії швидко стають домінуючими й провідність експоненційно збільшується. Ширина забороненої зони, визначено за високотемпературним нахилом залежності $\lg \sigma = f\left(\frac{10^3}{T}\right)$ рівна 0.74 еВ.

Залежність коефіцієнта Холла від температури наведено на рис.1б. Як випливає з рис.1б, зміна коефіцієнта Холла з температурою добре узгоджується зі зміною електропровідності. Величина ширини забороненої зони визначена за коефіцієнтом Холла, тобто за

високотемпературним нахилом залежності $\lg\left(RT^{3/2}\right) = f\left(\frac{10^3}{T}\right)$ рівна 0.76 eВ. Слід зазначити, що ширина забороненої зони 0.56 eВ, визначена в такий спосіб, не дуже узгоджується зі значенням, знайденим з експериментів з оптичного поглинання або фотопровідності (0.56 eВ) [10].

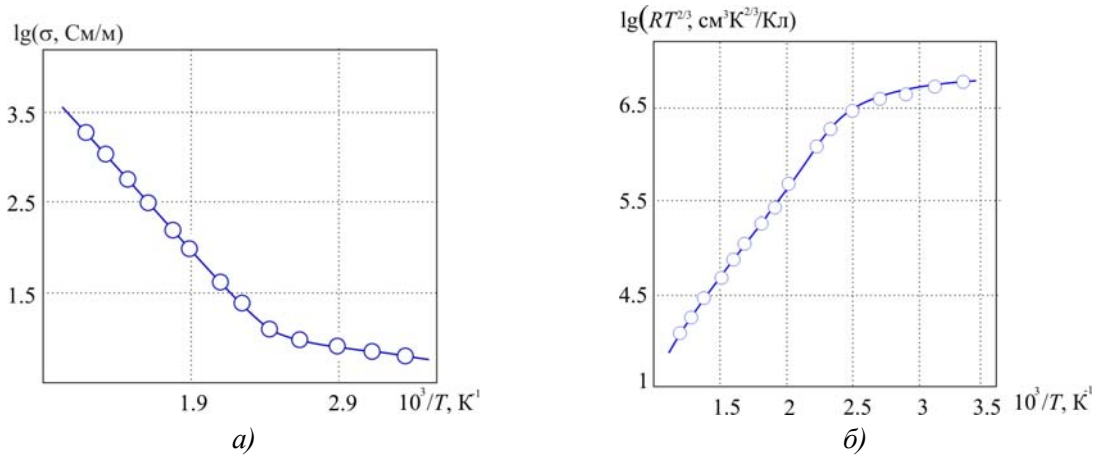


Рис. 1. Температурні залежності питомої електропровідності (а) і коефіцієнта Холла (б) $InGaTe_2$.

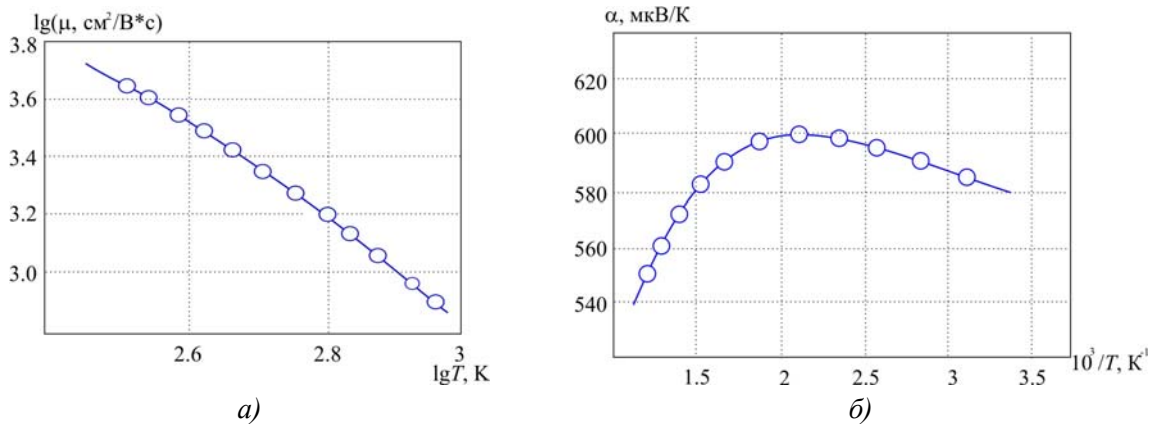


Рис. 2. Температурні залежності питомої електропровідності (а) і коефіцієнта термоЕРС (б) $InGaTe_2$.

Причина цієї розбіжності полягає в тому, що сама ширина забороненої зони залежить від температури. Якщо припустити, що всіма доданками, крім лінійного в розкладанні в ряд Тейлора величини $\Delta E(T)$ по температурі, – можна знехтувати й написати $\Delta E(T) = \Delta E(T=0) + \beta T$, то стає ясно, що ширина забороненої зони визначена з електропровідності, являє собою в першому наближенні енергетичну щілину при $T=0$, К й повинна збільшуватися з ростом температури.

З температурної залежності холлівської рухливості (рис. 2а) видно, що в дослідженому температурному інтервалі 300-900 К рухливість падає з ростом температури як $T^{-3/2}$, тобто в цьому випадку розсіювання носіїв заряду відбувається на поздовжніх акустичних фонах. Температурна залежність коефіцієнта термоЕРС $InGaTe_2$ наведена на рис.2б. Як впливає з рис.2б, у температурному інтервалі 300-500 К термоЕРС збільшується, а з настанням власної провідності зменшується, що є характерною рисою потрійних сполук типу $A^{III}B^{III}X_2^{VI}$ зі складною енергетичною структурою [4, 5, 18-22]. Зміна концентрації носіїв струму з температурою рис.3а добре

узгоджується з температурною зміною питомої електропровідності й коефіцієнта Холла (рис.1).

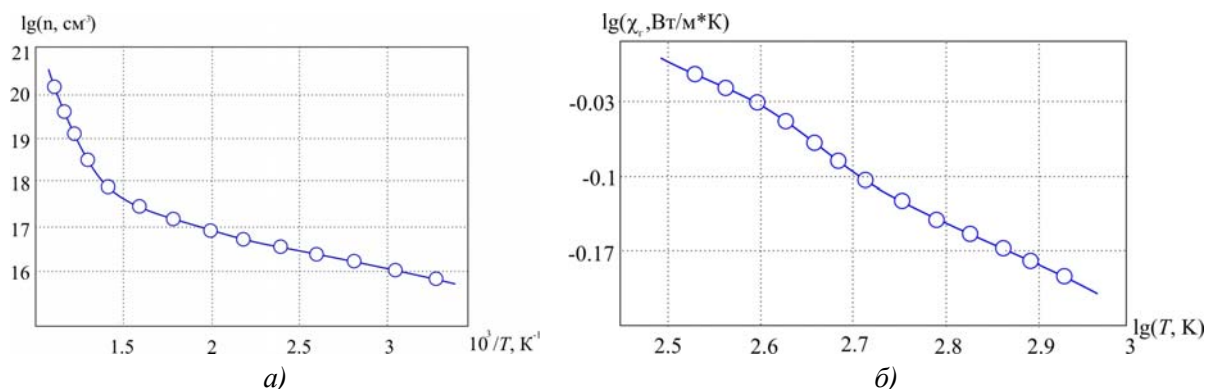


Рис. 3. Температурні залежності концентрації носіїв заряду (а) і коефіцієнта теплопровідності (б) $InGaTe_2$.

На рис.3б приводиться температурна залежність коефіцієнта теплопровідності $InGaTe_2$. Як впливає з рис.3б зміна теплопровідності з температурою відбувається за законом T^{-1} .

На основі отриманих даних по дослідженню електричних параметрів і теплопровідності визначена термоелектрична ефективність $InGaTe_2$ за формулою

$$Z = \frac{\alpha^2 \sigma}{\chi_e} \quad (1)$$

Величини, що входять в (1), є функціями температури й концентрації носіїв, що відповідно приводить до різкого характеру температурної й концентраційної залежностей Z .

У загальному вигляді залежність Z від температури й концентрації носіїв досить складна. Однак за низки спрощуючих припущень, зокрема наявності одного знака носіїв, відсутності виродження, малої величини електронної складової теплопровідності, вдається встановити зв'язок Z_{\max} з характеристичними параметрами кристалів [25].

$$Z_{\max} \sim N \frac{m^{*3/2} \mu T^{3/2}}{\chi_e} e^{r+\frac{1}{2}} \quad (2)$$

Тут N - число еліпсоїдів у зоні Бріллюена, m^* - ефективна маса носіїв, T - абсолютна температура, r - параметр механізму розсіювання, χ_e -граткова теплопровідність. Для $InGaTe_2$ $N = 4$ [4], провідність визначається p - типом провідності носіїв, основним механізмом є розсіювання на акустичних фононах з $r = -\frac{1}{2}$, тобто експоненціальний множник в (2) зникає.

Отримані дані по термоелектричній ефективності $InGaTe_2$ наведені в табл. 2. Видно, що в температурному інтервалі 500-900 К збільшується й при 900 К досягає свого максимального значення.

Висока термоелектрична ефективність кристала $InGaTe_2$ (табл. 2) у зазначеному температурному інтервалі обумовлена низьким значенням теплопровідності ґратки при значеннях рухливості $41 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$.

Таблиця 2

Фізичні параметри сполуки $InGaTe_2$

T, K	$\sigma, \text{См/м}$	$\alpha, 10^{-6} \text{ В/К}$	$\chi, \text{Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$	$R, \text{см}^3/\text{Кл}$	$\mu, \text{см}^2/\text{В} \cdot \text{сек}$	$n, \text{см}^{-3}$	$Z, 10^{-3}, \text{К}^{-1}$
300	6.3	580	0.84	794	780	$8 \cdot 10^{15}$	0.002
400	12	595	0.82	269	479	$2.3 \cdot 10^{16}$	0.005
500	31.6	600	0.79	72.4	160	$8.9 \cdot 10^{16}$	0.015
600	251	595	0.74	7.2	67	$8.7 \cdot 10^{17}$	0.12
700	646	590	0.69	2.02	58	$3 \cdot 10^{18}$	0.32
800	1260	570	0.66	0.98	41	$6.3 \cdot 10^{18}$	0.62
900	2512	540	0.63	0.122	22	$8.9 \cdot 10^{19}$	1.16

Низькі значення χ_e у значній мірі визначаються великою масою атомів, що утворюють $InGaTe_2$, а відносно високі значення рухливості обумовлює мала величина ефективної маси носіїв. Очевидно, збільшенню термоелектричної ефективності сприяє більш глибоке розсіювання фононів у порівнянні з електронами. Однак вираш μ/χ_e , як правило, зменшується з ростом температури, тому що внаслідок фонон-фононного розсіювання послаблюється температурна залежність теплопровідності.

Відомо, що експериментальне визначення параметрів елементарних ґраток кристалів – трудомістка робота. У зв'язку із цим, в даній роботі, ми теоретично обчислили параметри елементарної ґратки $InGaTe_2$, з використанням результатів розрахунків зонної структури $InGaTe_2$ [22]. Розрахунки проводилися методом функціонала густини, за допомогою пакета програм АВІНІТ з використанням псевдопотенціалів Троїллера-Мартинса в базисі плоских хвиль [27]. У розкладанні хвильової функції використовувалися плоскі хвилі з максимальною кінетичною енергією 30 На (На – енергія Хартрі). Параметри ґратки визначалися шляхом мінімізації повної енергії, а параметри структури оптимізувалися за допомогою сил Гельмана-Фейнмана. Процес мінімізації сил здійснювався доти, поки модулі сил $|\vec{F}| < 3 \frac{\text{mRy}}{\text{a.o.}}$.

Відомо, що при зовнішньому впливі на кристал, – він зазнає деформації. При цьому міняються й параметри ґратки, і параметри, що визначають положення атомів (їх координати). Тому розрахунки цих параметрів при заданому значенні деформації є важливою задачею. Вважається, що тиск визначається похідною повної енергії від об'єму при постійній ентропії S $P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S$, а модуль всебічного стискування – похідною тиску від об'єму при постійній температурі $B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T$. На практиці похідна модуля всебічного стискування знаходиться при малих змінах тиску $B' = \left(\frac{\partial B}{\partial P}\right)_T$. Якщо прийняти, що $B' = B'_0$, то $B = B_0 + B'_0 P$

Тоді

$$\frac{dV}{V} = -\frac{dP}{B_0 + B'_0 P}. \quad (3)$$

При інтегруванні цього виразу одержуємо

$$P(V) = \frac{B_0}{B'_0} \left(\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} - 1 \right). \quad (4)$$

Звідки маємо

$$V(P) = V_0 \left(1 + B'_0 \frac{P}{B_0} \right)^{-1/B'_0}. \quad (5)$$

Як відомо, тверді тіла мають певний об'єм рівноваги елементарної ґратки V_0 , і зі зміною цього об'єму на малу величину повна енергія кристала збільшується. Рівняння стану Мурнагана [26] описує залежність повної енергії E від зміни об'єму V елементарної ґратки.

$$E(V) = E_0 + \left[\frac{B_0 V}{B'_0} \left(\frac{V_0 / V}{B'_0 - 1} + 1 \right) - \frac{B_0 V}{B'_0 - 1} \right] \frac{1}{14703.6}. \quad (6)$$

Тут $E_0 = E(V_0)$ – енергія, що відповідає об'єму V_0 рівноваги (тобто мінімуму енергії), $B = -V(\delta P / \delta V)_T$ – модуль всебічного стискування, B_0 – той же параметр у стані рівноваги, що відповідає тиску $P = 0$, $B' = (\delta B / \delta P)_T$ – його перша похідна по тискові при постійній температурі. Множник $\frac{1}{14703.6}$ у рівнянні введений для одержання значень повної енергії в одиницях Рідберга (об'єм обчислюється в атомних одиницях – а.о.).

Для визначення параметрів кристалічної ґратки в розрахунках ми змінювали об'єм елементарної ґратки в межах $\pm 8\%$ і розраховували відповідні значення повної енергії. Параметри, що входять у рівняння стану Мурнагана, були підібрані в такий спосіб, щоб залежність повної енергії від об'єму елементарної ґратки $E(V)$ (рис. 4), отримана з рівняння (показана на рис.4. суцільною лінією), проходила через розраховані точки.

Згідно з отриманими результатами розрахунків об'єм елементарної ґратки в стані рівноваги $V_0 = 6268.1419$ а.о., модуль всебічного стискування $B = 40.2392$ ГПа, його похідна по тиску $B' = 4.5588$.

Ці результати добре узгоджуються з розрахунками, проведеними за рівнянням Бірч-Мурнагана [28] (табл. 3).

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0 B_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^3 B'_0 + \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \right\} \frac{1}{14703.6}. \quad (7)$$

В силу того, що об'єм елементарної комірки рівний $V = abc$ і отриманий об'єм стану рівноваги $V_0 = 6268.1419$ а.о., розрахунки дозволяють знайти параметри ґратки.

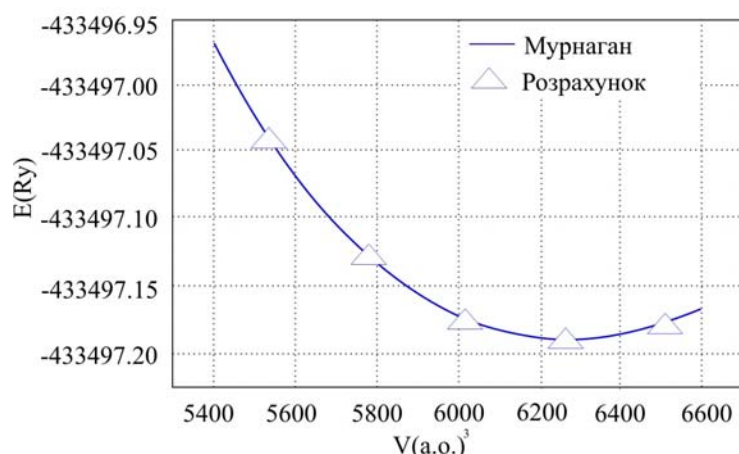


Рис. 4. Залежність повної енергії від об'єму елементарної ґратки $InGaTe_2$.

Таблиця 3.

Параметри рівнянь стану Мурнагана й Бірч-Мурнагана.

Параметр	По Мурнагану	По Бірч-Мурнагану
$V_0, \text{a.o.}$	6268,1419	6267.8101
$E_0, \text{Р.}$	-433437.189425	-433497.189401
$B, \text{ГПа}$	40.2392	40.1350
B'	4.5588	4.7886

Розраховані нами параметри кристалічної ґратки $a = 8.3945 \text{ \AA}$; $c = 6.8352 \text{ \AA}$ і координати атомів $x = 0.1730$ в елементарній ґратці добре узгоджуються з нашими експериментальними даними й даними [10]. Слід зазначити, що отримані результати дають можливість розрахувати надалі фононний спектр і вивчити вплив деформації на електронні й оптичні властивості $InGaTe_2$, теоретично розрахувати параметри елементарних ґраток інших сполук з відомою зонною структурою.

Відомо, що ефективна маса є основною характеристикою електронних властивостей напівпровідників. Ефективна маса використовується у вивченні електричних і магнітних властивостей, при обчисленні кінетичних параметрів і аналізі критичних точок оптичних параметрів.

Компоненти тензора оберненої ефективної маси обчислюються по формулі:

$$\left[\frac{m_0}{m^*} \right] = \delta_{ij} + \frac{2}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n_1 k_0 | P_i | n'_1 k_0 \rangle \langle n'_1 k_0 | P_j | n_1 k_0 \rangle}{E_n(k_0) - E_{n'}(k_0)}, \quad (8)$$

де m_0 – маса спокою електрона; δ_{ij} – символ Кронекера, $\langle n_1 k_0 | P_i | n'_1 k_0 \rangle$ – магнітний елемент оператора імпульсу.

$P_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$ – в точці екстремуму k_0 . Індеси $n; n'$ нумерують електронні зони, $|n_1 k_0\rangle$ – хвильова функція електрона, а

$$\langle n_1 k_0 | P_i | n'_1 k_0 \rangle = \frac{1}{\lambda} \int_{\lambda} \varphi_{n k_0}^*(r) P_i \varphi_{n'_1 k_0}(r) d^3 r \quad (9)$$

λ -об'єм елементарної комірки.

Енергетичний спектр $E_n(k_0)$ і відповідна хвильова функція $\varphi_{n k_0}(r)$ в точці екстремуму k_0 визначаються з одноелектронного рівняння Шредінгера. У базисі плоских хвиль

$$\sum_{G'} \left[\frac{\hbar(k_0 + G')}{2m_e} \delta_{GG'} + V(k_0 + G_1 k_0 + G') \right] \phi_n(k_0 + G') = E_{n k_0} \phi_n(k_0 + G) - V(k_0 + G_1 k_0 + G') \quad (10)$$

Фур'є образ кристалічного псевдопотенціалу.

У $InGaTe_2$ максимум валентної зони й мінімум зони провідності перебувають у високосиметричній точці T , $\kappa_0 = 0.5b_1 \cdot 0.5b_2 + 0.5b_3(b_1, b_2, b_3)$ – базисні трансляції оберненої ґратки [22]. В наших розрахунках компоненти тензора оберненої ефективної маси електрона обчислені з точністю до $0.01m_0$.

$$\begin{pmatrix} m_0 \\ m_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3.09 & 0 & 0 \\ 0 & 3.09 & 0 \\ 0 & 0 & 4.59 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Тензорні компоненти оберненої ефективної маси дірок

$$\begin{pmatrix} m_0 \\ m_{p\perp}^* \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -2.31 & 0 & 0 \\ 0 & -2.31 & 0 \\ 0 & 0 & -0.11 \end{bmatrix}. \quad (12)$$

Тензори оберненої ефективної маси як електронів, так і дірок мають діагональний вигляд, і тому ізоенергетичні поверхні є еліпсоїдами обертання. Це також впливає з симетрії кристала $InGaTe_2$, що ізоенергетичні поверхні повинні бути еліпсоїдами обертання.

Висновки

1. У роботі експериментальними дослідженнями температурних залежностей питомої електропровідності, коефіцієнта Холла, термоЕРС і теплопровідності визначили ширину забороненої зони, концентрацію, холлівську рухливість носіїв заряду й коефіцієнта термоелектричну ефективність сполуки $InGaTe_2$ й виявлено, що ширина забороненої зони, визначена з електропровідності (0.74 еВ) і за коефіцієнтом Холла (0.76 еВ) перебувають в хорошому узгодженні.
2. Вперше, використовуючи результати розрахунків зонної структури $InGaTe_2$, за допомогою пакета програми АВІНІТ теоретично обчислили параметри елементарної ґратки даної фази й виявили, що нами обчислені й експериментально визначені значення цих параметрів добре узгоджуються, обчислені тензори оберненої ефективної маси електронів і дірок.

Література

1. Hahn H, Weltman B. Uber ternare chalkogenide des Thalliums mit Gallium und Indium. Naturwissenschaften. 1967;54(2):42-48.
2. Muller D, Eulenberger G, und Hahn H. Uber ternare Thalliumchalkogenide mit thalliums selenid-structur. Z. anorg. allg. chem.1973;398(2):207-220 .
3. Mooser E, Pearson WB. The chemical bond in semiconductors. J. Electronics.1956;1(6): P. 629-645.
4. Гусейнов Г.Д. Поиск и физические исследования сложных полупроводников аналогов. / Г.Д. Гусейнов // Автореферат дис. докт. физ-мат наук. Вильнюс, 1972, 81с.
5. Годжаев Э.М., Структура, электронные и тепловые свойства сложных полупроводников на основе sp и $4f$ элементов: / Э.М. Годжаев // автореферат дис. докт. физ. мат. наук, Баку: ФИАН АзССР, 1985, с.31.
6. Физико- химические исследования систем $A^{III} X^{VI} - B^{III} X^{VI}$ / Г.Д. гусейнов, Э.М. Керимова, Э.М. Годжаев [и др.] // Ж.Физическая Химия, 1971 – Т.45, №5. – С.1458-1463.
7. Гусейнов Г.Д., Сеидов Ф.М., Пашаев А.М., Исследования системы $TlS-GaS$. Изв.АН СССР, Неорганические материалы , 1972. – Т.8, № 11. – С.170-174.
8. Гусейнов Г.Д. О псевдобинарной системе? / Г.Д. Гусейнов, Ф.М. Сеидов, Х.Я. Халилов // ЖФХ, 1972. – Т.46, №3. – С.803-806.
9. Кулиев А.А. Исследование системы $TlSe-GaSe$. / А.А. Кулиев, З.Г. Каграмянц // Изв.вузов химия и хим. технология. – 1977. – Т.20, №4. – С. 606 – 608.
10. Mobarak M, Berger H., Lorusso G.F. et al. The Growth and Properties of Single Crystals of $GaInTe_2$, a Ternary Chalkogenide Semiconductor // J. Phys. D: Appl. Phys. 31.(1998). – P. 1433–1437.
11. Алиев В.А. Реальная структура, фотоэлектрические явления в кристаллах $TlA^{III} B_2^{VI}$ / В.А. Алиев // Автореферат дисс. докт. физ.- мат. наук, Баку, 1997, С. 34.
12. Абдуллаев Н.А. Особенности теплового расширения слоистых кристаллов / Н.А. Абдуллаев // Автореферат дисс. канд. физ-мат. наук, Баку, 1985. С. 22.
13. Ентальпії утворення та теплоємності сполук $TlGaSe_2$ та $TlGaS_2$. / В.И. Ткаченко, Ю.В. Ворошилов, Л.В. Костюк [и др.] // Допов. АН УРСР, серия (Б), Геологічні , хімічні та біологічні науки, 1980. – №12. – С.64-66
14. Термоэффективность твердых растворов системы $TlInTe_2$ - $TlPrTe_2$ Э.М. Годжаев, А.Э. Бахышов, А.Б. Нагиев // Изв.АН СССР, Неорганические материалы, 1987. – Т.23, № 10. – С. 1750-1753.
15. Годжаев Э.М. Термоэффективность твердых растворов $InTl_x Ga_{1-x} Te_2$ ($0 \leq x \leq 0.2$) Э.М. Годжаев, Х.О. Садыгова // Изв.РАН, Неорганические материалы, 1992. – Т.28, №10/11. – С. 2238-2241
16. Е.М. Годжаев Зонная структура $TlInTe_2$ й термоэффективність твердих розчинів на його основі / Е.М. Годжаев, Г.С. Джафарова, С.І. Сафарова // Термоелектрика, 2013, №1, С.28-33
17. Годжаев Э.М. Термоэлектрические свойства кристаллов $TlIn_{1-x} Yb_x Te_2$ ($0.01 \leq x \leq 0.04$) Э.М. Годжаев, Р.А. Керимова // Изв.РАН, Неорганические материалы, 2004, Т.40, №11 С. 1314-1316,
18. Orudzhev G, Mamedov N, Uchiki H, Yamamoto N, Iida S, Toyota H, Gojaev E, Hashimzade F. Band structure and optical functions of ternary chain $TlInSe_2$. // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2003;64: P. 1703-1706.
19. Godzhayev E.M, Orudzhev G.S, Kerimova R.A, Allakhyarov E.A. Band structure and optical properties of chained compound $TlInTe$. Physics of a firm body. 2006; 48: P. 40-43.

20. Зонная структура и диэлектрическая проницаемость соединения $TlGaTe_2$ / Э.М. Годжаев, Г.С. Оруджев, Д.М. Кафарова // Физика твердого тела, 2004. – Т.46. В.5. – С. 811-813.
21. Orudzhev G., Shim Y., Wakita K., Mamedov N., Jafarova S., Hashimzade F. Linearized Augmented Plane Wave band structure calculations and dielectric function of layered $TlGaSe_2$ // Jap. J. of Applied Physics, 2008. – V. 47, №10, P. 8182-8187.
22. Godzhayev E.M., Dzhakhangirli Z.A., Allakhyarov E.A., Kafarova D.M., Ibragimova A.R. Cultivation, phase analysis and band structure of a monocrystal of $InGaTe$ // Inorganic materials. 2011;47(10): P. 1162-1165.
23. E.M. Godzhaev, U.S. Abdurahmanova, Z.A. Dzhakhangirli, S.M. Mehdieva Optical Functions and Effective Masses of Electrons and Holes in $InGaTe_2$ Physical Science International Journal, 4(5): 699-707, 2014.
24. Павлов Л.П. Методы измерения параметров полупроводниковых материалов. / Л.П. Павлов // Москва, Высшая школа, 1987, С.7-42
25. Иоффе А.Ф. Избранные труды.Е.2 / А.Ф. Иоффе // Л:Наука,1975, С.468.
26. Murnghan F.D. The compressibility of media under extreme pressures // Proceedings of the National Academy of Sciences, 1944, – vol.30, – P.244-247.
27. Gonze X., Amadon B., Anglade P.-M., Beuken J.-M., Bottin F., Boulanger P., Bruneval F., etc., ABINIT: First-principles approach of materials and nanosystem properties.// Computer Phys. Comm., 2009, – v.180, – P. 2582-2615.
28. Birch F. Finite elastic strain of cubic crystals // Physical Review, 1947, – v. 71 – P. 809-824.

Надійшла до редакції 20.12.2013