

Годжаев Э.М., Абдурахманова У.С.



Годжаев Э.М.

Азербайджанский технический университет,  
пр. Г. Джавида, 25, Баку, АЗ 1073, Азербайджан



Абдурахманова У.С.

## ФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $InGaTe_2$

*В работе представлены результаты исследования температурных зависимостей удельной электропроводности, коэффициентов термоЭДС и теплопроводности в интервале температур 300 – 900 К соединения  $InGaTe_2$ , а также расчеты концентрации, холловской подвижности носителей тока и термоэлектрической эффективности этого полупроводникового соединения. На основе зонной структуры данной фазы теоретически рассчитаны параметры элементарной ячейки, эффективные массы электронов и дырок. Рассчитанные величины параметров элементарной ячейки хорошо согласуются с экспериментальными данными.*

**Ключевые слова:** соединения  $InGaTe_2$ , зонная структура, эффективная масса, параметры элементарной ячейки, термоэлектрическая эффективность.

*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.

### Введение

Известно, что поиск новых полупроводниковых материалов обычно ведется в направлении расширения кристаллоструктурной группы уже известных материалов.

В частности, расшифровкой кристаллической структуры  $TlSe$  выявлено, что данная фаза отличается крайними специфическими особенностями. Решетка  $TlSe$  оказывается составленной из двух самостоятельных структурных единиц: из октаэдра с ионным характером связи  $Tl^{1+}-Se$  и тетраэдра с ковалентной связью  $Tl^{3+}-Se$ . Следовательно, химическую формулу  $TlSe$  следует писать как  $Tl^+Tl^{3+}Se_2$  [1-3]. В последующих работах [4, 5] замещением трехвалентного атома таллия атомами индия и галлия в решетках типа  $TlSe$  получен новый класс полупроводниковых соединений типа  $A^{III}B^{III}X_2^{VI}$ .

Рентгеноструктурными исследованиями выявлено, что часть этих соединений имеет цепочечную, а другая – слоистую структуру. Соединения с цепочечной структурой кристаллизуются в тетрагональной сингонии, пространственная группа  $D_{4h}^{18}$  (I4/mcm) [2, 3].

Существование соединений вышеуказанного типа является реальностью и с точки зрения электронного строения составляющих атомов. При образовании соединений типа  $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$  внешние электронные оболочки двух атомов халькогена с электронной оболочкой  $2(s^2p^4)$  за счет одного ( $6p^1$ ) электрона одновалентного таллия (или индия) и одного ( $5s^2p^1$ ) трехвалентного индия (или галлия) достраиваются до устойчивой  $2(s^2p^6)$  конфигурации.

В работах [3, 4] экспериментально доказано, что атомы  $Tl$  при взаимодействии даже с элементами своей подгруппы ( $In, Ga$ ) проявляют одновалентное состояние с внешней  $6s^26p^1$  электронной конфигурацией. Одновалентное состояние характерно также для элементов индия и галлия, тем не менее эти элементы при конкуренции с таллием проявляют нормальную валентность с внешней конфигурацией электронов  $5s^25p^1$  и  $4s^24p^1$ , соответственно.

Реальность данного предположения следует из того факта, что  $5s^2$  оболочки индия и  $4s^2$  оболочки галлия по сравнению с  $6s^2$  оболочкой таллия менее устойчивы, т.е. вероятность проявления одновалентного состояния, а, следовательно, и занятия ими октаэдрического положения в решетках типа  $TlSe$ , при прочих равных условиях уменьшается в последовательности  $Tl \rightarrow In \rightarrow Ga$ . Поэтому, соединения  $TlInX_2^{VI}$ ,  $TlGaX_2^{VI}$  и  $InGaX_2^{VI}$  при наличии их изоструктурности отличаются соответствующими анионными радикалами  $[Tl^{3+}X_2^{VI}]^-$ ,  $[In^{3+}X_2^{VI}]^-$  и  $[Ga^{3+}X_2^{VI}]^-$  и шириной запрещенной зоны [4].

Существование тройных соединений типа  $A^{III}B^{III}X_2^{VI}$  подтверждено методами дифференциально-термического, микроструктурного и рентгенофазового анализов [6-9]. В последующих работах исследовались их электрофизические, тепловые, оптические и фотоэлектрические свойства и выявлено, что эти соединения обладают высокими коэффициентами фото- и тензочувствительности, переключающими свойствами с памятью [11-13], а также, что теллуриды и их твердые растворы обладают высокими коэффициентами термоэлектрической эффективности [14-17]. Исследован энергетический спектр соединений  $TlInSe_2(Te_2)$   $TlGaSe_2(Te_2)$  [22-25], рассчитаны их оптические функции, определены происхождение валентной зоны и зоны проводимости, ширина запрещенной зоны, эффективные массы электронов и дырок, параметры элементарной ячейки. Однако данные по исследованию соединений  $InGaSe_2(Te_2)$  немногочисленны, несмотря на то, что о существовании этих соединений сообщалось еще в середине прошлого века [4]. В последующих работах [4, 5] исследовались их некоторые электрофизические свойства. В работе [10] выращены совершенные монокристаллы  $InGaTe_2$ ; рентгенофазовым анализом определены параметры их элементарных ячеек и выявлено, что  $InGaTe_2$ , также как и его другие структурные аналоги, кристаллизуется в тетрагональной сингонии.

Там же рассчитаны энергетические спектры, определены ширина запрещенной зоны, происхождение валентной зоны и зоны проводимости. Исследовались спектр фотолуминесценции и фотоэлектрические свойства, рассчитана электронная структура  $InGaTe_2$  и установлено, что полученные данные находятся в хорошем согласии с данными [22], где расшифрована зонная структура данной фазы. В работе [23] вычислены оптические функции  $InGaTe_2$ . Однако данные по исследованию температурных зависимостей электрических и тепловых свойств, результаты расчета параметров элементарных ячеек, эффективных масс электронов и дырок  $InGaTe_2$  отсутствуют.

Целью настоящей работы является исследование электрофизических свойств, расчет эффективных масс электронов и дырок, а также параметров элементарных ячеек  $InGaTe_2$ .

## Экспериментальная часть

Электропроводность ( $\sigma$ ), коэффициенты Холла ( $R$ ), термоЭДС ( $\alpha$ ) и теплопроводность ( $\chi_p$ ) измерялись по методике, описанной в [24]. Погрешности измерения  $\sigma$ ,  $R$ ,  $\alpha$  и  $\chi$  составляли 5, 6, 7 и 4 % соответственно.

Соединение  $InGaTe_2$  синтезировано сплавлением исходных компонентов, взятых в стехиометрическом соотношении, в откачанных до 0.0133 Па и запаянных кварцевых ампулах.

Для синтеза  $InGaTe_2$  использовались элементы чистотой  $In - 000$ ,  $Ga - 99.996$ ,  $Te - 99.997$  %. Ампулы вначале очищались смесью HF с дистиллированной водой. После химической очистки вакуумированные до 0.0133 Па ампулы помещали в печь при 1000 °C на 24 часа, после чего охлаждали, наполняли высокоочищенными элементами. Для гомогенизации сплава смесь выдерживалась 24 часа при температуре 970 °C. Во время процесса синтеза ампулы часто встряхивали с целью лучшего смешивания компонентов. Далее ампула с веществом со скоростью 1.33 мм в час перемещалась из высокотемпературной зоны в зону кристаллизации с соответствующей температурой 700 °C. После охлаждения до комнатной температуры полученные кристаллы подвергались рентгенофазовому анализу. Результаты рентгенофазового анализа приводятся в таблице 1.

Таблица 1

*Результаты рентгенофазового анализа  $InGaTe_2$*

$\theta$	$d_{расч}, \text{Å}$	$d_{экс}, \text{Å}$	$hkl$	$I_{отн}$
$10^{\circ}31'$	4.2300	4.2217	200	6
$13^{\circ}42'$	3.2600	3.2554	211	100
$22^{\circ}26'$	2.9911	2.020	220	14
$23^{\circ}01'$	1.9685	1.9661	411	33
$23^{\circ}22'$	1.9439	1.9442	332(402)	29
$24^{\circ}39'$	1.8770	1.8662	420	18
$25^{\circ}12'$	1.8102	1.8111	421	11
$27^{\circ}20'$	1.6788	1.6784	340(500)	22
$30^{\circ}46'$	1.5072	1.5140	502	10
$32^{\circ}49'$	1.4227	1.4192	522	9

Рентгенофазовый анализ показал, что соединение  $InGaTe_2$  кристаллизуется в тетрагональной сингонии с параметрами решетки  $a = 8.463 \text{ Å}$ ,  $c = 6.981 \text{ Å}$ . Эти величины хорошо согласуются с данными [10]:  $a = 8.412 \text{ Å}$ ,  $c = 6.875 \text{ Å}$ .

## Результаты и их обсуждение

Результаты исследования температурных зависимостей электропроводности, коэффициентов Холла, термоЭДС и теплопроводности, вычисленные значения холловской подвижности, концентрации свободных носителей тока и коэффициента термоэлектрической эффективности соединения  $InGaTe_2$  приводятся в таблице и на рисунках 1 – 3. Как следует из рис. 1  $a$ , удельная электропроводность с увеличением температуры от комнатной до 400 К относительно мала, а с наступлением собственной проводимости собственные носители быстро становятся доминирующими и проводимость экспоненциально увеличивается. Ширина запрещенной зоны, определенная по высокотемпературному наклону зависимости  $\lg \sigma = f(10^3/T)$ , равна 0.74 эВ.

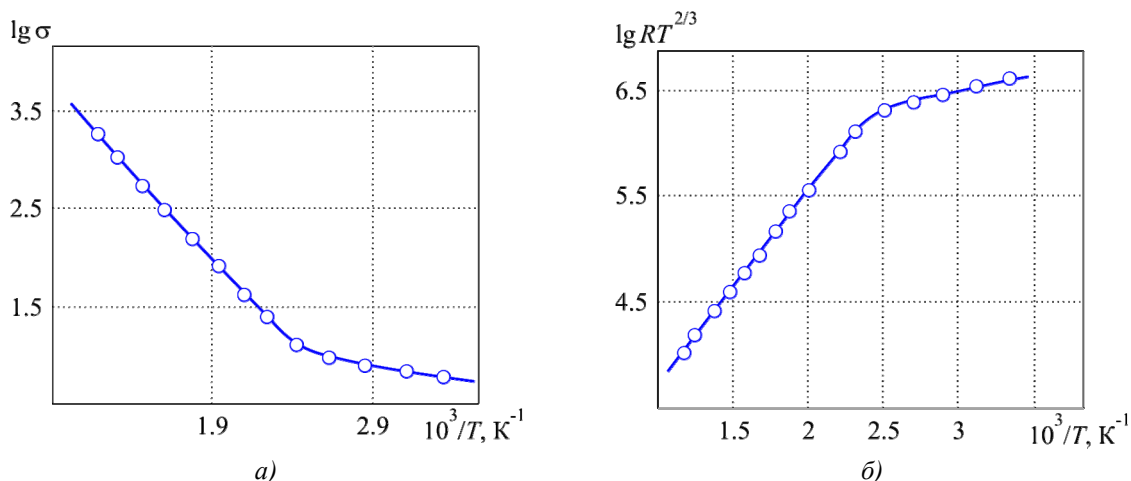


Рис. 1. Температурные зависимости удельной электропроводности  $\sigma$  (См/м) (а) и коэффициента Холла  $R$  (см<sup>3</sup>/Кл) (б)  $InGaTe_2$ .

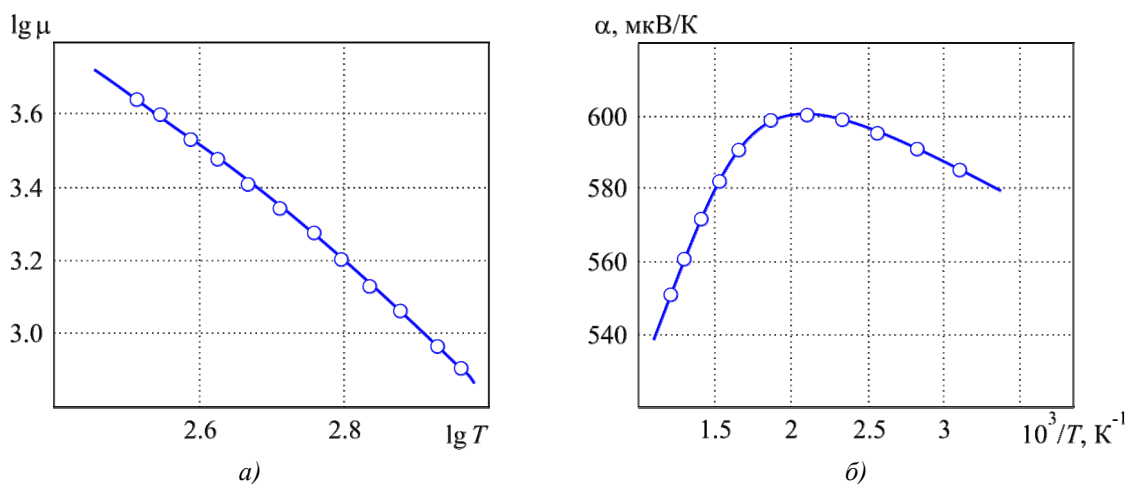


Рис. 2. Зависимости холловской подвижности носителей  $\mu$  (см<sup>2</sup>/В·с) (а) и коэффициента термоЭДС  $\alpha$  (б)  $InGaTe_2$  от температуры  $T$ (К).

Зависимость коэффициента Холла от температуры приводится на рис. 1, б. Как следует из рис. 1, б, изменение коэффициента Холла с температурой хорошо согласуется с изменением электропроводности. Величина ширины запрещенной зоны, определенная по коэффициенту Холла, т.е. по высокотемпературному наклону зависимости  $\lg RT^{3/2} = f(10^3/T)$  равна 0.76 эВ. Следует отметить, что ширина запрещенной зоны 0.56 эВ, определенная таким образом, не находится в хорошем согласии со значением, найденным из экспериментов по оптическому поглощению или фотопроводимости (0.56 эВ) [10]. Причина этого расхождения состоит в том, что сама ширина запрещенной зоны зависит от температуры. Если предположить, что все, кроме линейного, слагаемые в разложении в ряд Тейлора по температуре величины  $\Delta E(T)$ , пренебрежимо малы, и написать  $\Delta E(T) = \Delta E(T=0) + \beta T$ , то становится ясно, что ширина запрещенной зоны, определенная по электропроводности, представляет собой в первом приближении энергетическую щель при  $T = 0$  К и должна увеличиваться с ростом температуры.

Из температурной зависимости холловской подвижности (рис. 2, а) видно, что в исследуемом температурном интервале 300 – 900 К подвижность падает с ростом температуры как  $T^{-3/2}$ , т.е. в этом случае рассеяние носителей заряда происходит на продольных акустических фононах. Температурная зависимость коэффициента термоЭДС  $InGaTe_2$  приведена на рис. 2, б.

Из рисунка видно, что в температурном интервале 300 – 500 К термоЭДС увеличивается, а при достижении собственной проводимости уменьшается, что является характерной особенностью тройных соединений типа  $A^{III}B^{III}X_2^{VI}$  со сложной энергетической структурой [4, 5, 18-22]. Изменение концентрации носителей тока с температурой (рис. 3, а) хорошо согласуется с температурным изменением удельной электропроводности и коэффициента Холла (рис. 1).

На рис. 3, б приводится температурная зависимость коэффициента теплопроводности  $InGaTe_2$ . Как следует из рис. 3, б, изменение теплопроводности с температурой происходит по закону  $T^{-1}$ .

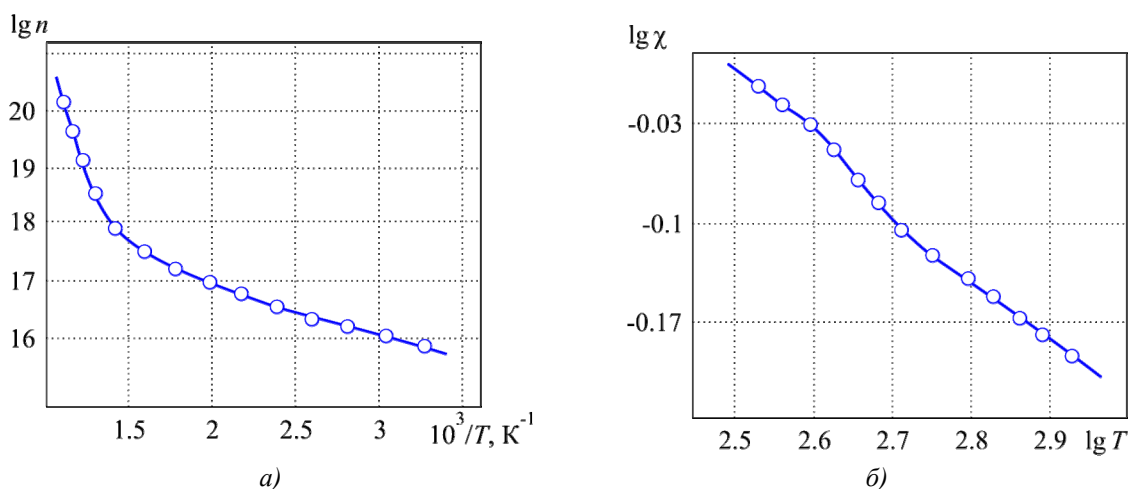


Рис. 3. Температурные зависимости концентрации носителей заряда  $n$  ( $см^{-3}$ ) (а) и коэффициента теплопроводности  $\chi$  ( $Вт/м\cdot К$ ) (б)  $InGaTe_2$ .

На основе полученных данных по исследованию электрических параметров и теплопроводности определена термоэлектрическая эффективность  $InGaTe_2$  по формуле

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

Величины, входящие в (1), являются функциями температуры и концентрации носителей, что соответственно приводит к резкому характеру температурной и концентрационной зависимостей  $Z$ .

В общем случае зависимость  $Z$  от температуры и концентрации носителей достаточно сложна. Однако при ряде упрощающих предположений, например, о наличии одного знака носителей, отсутствии вырождения, малой величины электронной составляющей теплопроводности, удается установить связь  $Z_{max}$  с характеристическими параметрами кристаллов [25].

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

Здесь  $N$  – число эллипсоидов в зоне Брюллюэна,  $m^*$  – эффективная масса носителей,  $T$  – абсолютная температура,  $r$  – параметр механизма рассеяния,  $\chi_p$  – решеточная теплопроводность. Для  $InGaTe_2$  с  $N = 4$  [4], проводимость определяется  $p$ -типом носителей, а основным механизмом является рассеяние на акустических фононах с  $r = -1/2$ , т.е. экспоненциальный множитель в (2) исчезает.

Полученные данные по термоэлектрической эффективности  $InGaTe_2$  приведены в таблице 2. Видно, что в температурном интервале 500 – 900 К термоэлектрическая эффективность

увеличивается и при 900 К достигает своего максимального значения.

Высокая термоэлектрическая эффективность кристалла  $InGaTe_2$  в указанном температурном интервале обусловлена низким значением теплопроводности решетки при значениях подвижности  $41 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ .

Таблица 2

Физические параметры соединения  $InGaTe_2$

$T, \text{ К}$	$\sigma, \text{ См/м}$	$\alpha, 10^{-6} \text{ В/К}$	$\chi, \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$	$R, \text{ см}^3/\text{Кл}$	$\mu, \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$	$n, \text{ см}^{-3}$	$Z\cdot 10^{-3}, \text{ К}^{-1}$
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	0.112	22	$8.9\cdot 10^{19}$	1.16

Низкие значения  $\chi_p$  в значительной степени определяются большой массой атомов, образующих  $InGaTe_2$ , а относительно высокие значения подвижности обуславливает малая величина эффективной массы носителей. По-видимому, увеличению термоэлектрической эффективности способствует более глубокое рассеяние фононов по сравнению с электронами. Однако выигрыш  $\mu/\chi_p$ , как правило, уменьшается с ростом температуры, так как вследствие фонон-фононного рассеяния ослабляется температурная зависимость теплопроводности.

Известно, что экспериментальное определение параметров элементарных ячеек кристаллов трудоемкая работа. В связи с этим в настоящей работе мы теоретически вычислили параметры элементарной ячейки  $InGaTe_2$  с использованием результатов расчета зонной структуры  $InGaTe_2$  [22]. Расчеты проводились методом функционала плотности, при помощи пакета программ ABINIT и с использованием псевдопотенциалов Троиллера-Мартинса в базисе плоских волн [27]. В разложении волновой функции использовались плоские волны с максимальной кинетической энергией  $30 \text{ Ha}^*$ . Параметры решетки определялись путем минимизации полной энергии, а параметры структуры оптимизировались с помощью сил Гельмана-Фейнмана. Процесс минимизации сил осуществлялся до тех пор, пока модули сил не удовлетворяли условию  $|\vec{F}| < 3 \frac{\text{мР}}{\text{a.e.}}$ .

Известно, что при внешнем воздействии на кристалл, он подвергается деформации. При этом меняются и параметры решетки, и параметры, определяющие положение атомов в ней. Поэтому расчет этих параметров при заданном значении деформации является важной задачей. Считается, что давление определяется производной  $P = -(\partial E/\partial V)_S$  полной энергии по давлению при постоянной энтропии  $S$ , а модуль всестороннего сжатия – производной  $B = -V(\partial P/\partial V)_T$  от давления по объему при постоянной температуре. На практике производная модуля всестороннего сжатия находится при малых изменениях давления  $B' = (\partial B/\partial P)_T$ . Если принять, что  $B' = B'_0$ ,  $B = B_0 + B'_0 P$ , то можно записать

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

Интегрированием этого выражения получаем

\* Энергия Хартри.

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

откуда

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

Как известно, твердые тела имеют определенный равновесный объем элементарной ячейки  $V_0$ , с его изменением на малую величину полная энергия кристалла увеличивается. Уравнение состояния Мурнагана [26] описывает зависимость полной энергии  $E$  от изменения объема  $V$  элементарной ячейки

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

Здесь  $E_0 = E(V_0)$  – энергия, соответствующая равновесному объему  $V_0$  (т.е. минимуму энергии),  $B = -V(\delta P/\delta V)_T$  – модуль всестороннего сжатия,  $B_0$  – тот же параметр в состоянии равновесия, соответствующий давлению  $P = 0$ ,  $B' = (\delta B/\delta P)_T$  – его первая производная по давлению при постоянной температуре. Множитель  $1/14703.6$  в уравнении введен для получения значений полной энергии в единицах Р. (объем вычисляется в атомных единицах – а.е.).

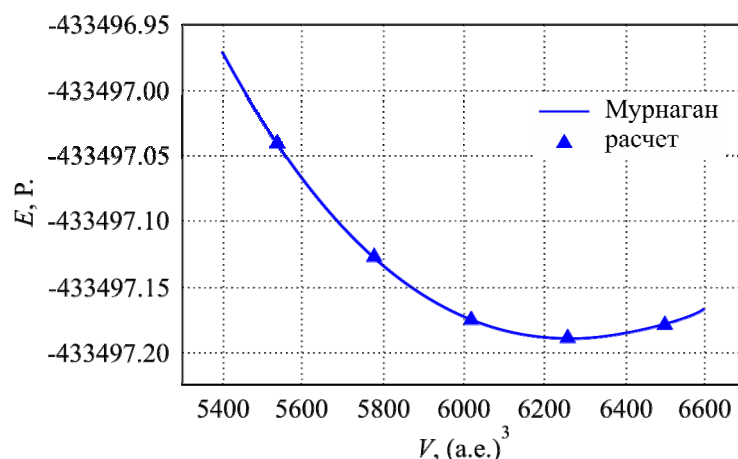


Рис. 4. Зависимость полной энергии от объема элементарной ячейки  $InGaTe_2$ .

Для определения параметров кристаллической решетки в расчетах мы изменяли объем элементарной ячейки в пределах  $\pm 8\%$  и рассчитывали соответствующие значения полной энергии. Параметры, входящие в уравнение состояния Мурнагана, были подобраны таким образом, чтобы зависимость полной энергии от объема элементарной ячейки  $E(V)$  (рис. 4), полученная из уравнения (показана на рис. 4. сплошной линией), проходила через рассчитанные точки.

Согласно полученным результатам расчетов, объем элементарной ячейки в состоянии равновесия  $V_0 = 6268.1419$  а.е., модуль всестороннего сжатия  $B = 40.2392$  ГПа, его производная по давлению  $B' = 4.5588$ . Эти результаты хорошо согласуются с расчетами, проведенными согласно уравнению Бирч-Мурнагана [28] (таблица 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, что объем элементарной ячейки равен  $V = abc$  и полученный объем равновесного состояния  $V_0 = 6268.1419$  а.е., расчеты позволяют найти параметры решетки.

Таблица 3

Параметры уравнений состояния Мурнагана и Бирч-Мурнагана

Параметр	По Мурнагану	По Бирч-Мурнагану
$V_0$ , а.е.	6268.1419	6267.8101
$E_0$ , Р.	-433437.189425	-433497.189401
$B$ , ГПа	40.2392	40.1350
$B'$	4.5588	4.7886

Рассчитанные нами параметры кристаллической решетки  $a = 8.3945 \text{ \AA}$ ;  $c = 6.8352 \text{ \AA}$  и координаты атомов  $x = 0.1730$  в элементарной ячейке хорошо согласуются с нашими экспериментальными данными и данными [10]. Следует отметить, что полученные результаты дают возможность рассчитать в дальнейшем фоннный спектр и изучить влияние деформации на электронные и оптические свойства  $InGaTe_2$ , теоретически рассчитать параметры элементарных ячеек других соединений с известной зонной структурой.

Известно, что эффективная масса является основной характеристикой электронных свойств полупроводников. Она используется при изучении электрических и магнитных свойств, при вычислении кинетических параметров и анализе критических точек оптических параметров.

Компоненты тензора обратной эффективной массы вычисляются по формуле

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

где  $m_0$  – масса покоя электрона,  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера,  $\langle n_1 k_0 | P_i | n'_1 k_0 \rangle$  – магнитный элемент оператора импульса,  $P_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$  в точке экстремума  $k_0$ . Индексы  $n, n'$  нумеруют электронные зоны,  $|n_1 k_0\rangle$  – волновая функция электрона, а

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

где  $\lambda$  – объем элементарной ячейки.

Энергетический спектр  $E_n(k_0)$  и соответствующая волновая функция  $\Phi_{n k_0}(r)$  в точке экстремума  $k_0$  определяются из одноэлектронного уравнения Шредингера. В базисе плоских волн

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

Фурье-образ кристаллического псевдопотенциала.

В  $InGaTe_2$  максимум валентной зоны и минимум зоны проводимости находятся в высокосимметричной точке  $T$ ,  $\kappa_0 = 0.5b_1 - 0.5b_2 + 0.5b_3$ , где  $(b_1, b_2, b_3)$  – базисные трансляции обратной решетки [22]. В наших расчетах компоненты тензора обратной эффективной массы электрона вычислены с точностью до  $0.01m_0$  и составляют величины

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

Компоненты тензора обратной эффективной массы дырок



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

Как видно, тензоры обратной эффективной массы и электронов, и дырок имеют диагональный вид, из чего следует, что изоэнергетические поверхности являются эллипсоидами вращения. То, что изоэнергетические поверхности должны быть эллипсоидами вращения, также следует из симметрии кристалла  $InGaTe_2$ .

## Выводы

1. Экспериментальными исследованиями температурных зависимостей удельной электропроводности, коэффициентов Холла, термоЭДС и теплопроводности определены ширина запрещенной зоны, величины холловской подвижности носителей заряда и термоэлектрической эффективности соединения  $InGaTe_2$ . Установлено, что ширина запрещенной зоны, определенная по электропроводности (0.74 эВ) и по величине коэффициента Холла (0.76 эВ) находится в хорошем согласии.
2. Впервые, на основании результатов расчета зонной структуры  $InGaTe_2$ , с использованием пакета программы ABINIT, теоретически вычислены параметры элементарной ячейки данной фазы и тензоры обратной эффективной массы электронов и дырок. Вычисленные нами и экспериментально полученные значения этих параметров хорошо согласуются.

## Литература

1. H. Hahn, B. Weltman, Uber ternare Chalkogenide des Thalliums mit Gallium und Indium, *Naturwissenschaften* 54 (2), 42 – 48 (1967).
2. D. Muller, G. Eulenberger, und H. Hahn, Uber ternare Thalliumchalkogenide mit thalliums-seleennid-structur, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 398 (2), 207 – 220 (1973).
3. E. Mooser, W.B. Pearson, The Chemical Bond in Semiconductors, *J. Electronics* 1 (6):629 – 645 (1956).
4. Гусейнов Г.Д. Поиск и физические исследования сложных полупроводников аналогов: автореф. дис. на соискание уч. степени докт. физ.-мат. наук / Г.Д. Гусейнов. – Вильнюс, 1972. – 81 с.
5. Годжаев Э.М. Структура, электронные и тепловые свойства сложных полупроводников на основе  $sp$  и  $4f$  элементов: автореф. дис. на соискание уч. степени докт. физ.-мат. наук / Э.М. Годжаев. – Баку: ФИАН АзССР, 1985. – 31 с.
6. Физико-химические исследования систем  $A^{III}X^{VI}-B^{III}X^{VI}$  / Г.Д. Гусейнов, Э.М. Керимова, Э.М. Годжаев [и др.] // Журнал физическая химия. – 1971. – Т. 45, № 5. – С. 1458 – 1463.
7. Гусейнов Г.Д. Исследования системы  $TlS-GaS$  / Г.Д. Гусейнов, Ф.М. Сеидов, А.М. Пашаев // Изв. АН СССР, Неорганические материалы. – 1972. – Т. 8, № 11. – С. 170 – 174.
8. Гусейнов Г.Д. О псевдобинирной системе / Г.Д. Гусейнов, Ф.М. Сеидов, Х.Я. Халилов // Журнал физическая химия. – 1972. – Т. 46, № 3. – С. 803 – 806.
9. Кулиев А.А. Исследование системы  $TlSe-GaSe$  / А.А. Кулиев, В.Г. Каграманян // Изв. вузов, Химия и хим. технология. – 1977. – Т. 20, № 4. – С. 606 – 608.
10. M. Mobarak, H. Berge, G.F. Lorusso et al., The Growth and Properties of Single Crystals of  $GaInTe_2$ , a Ternary Chalkogenide Semiconductor, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 31, 1433 – 1437 (1998).
11. Алиев В.А. Реальная структура, фотоэлектрические явления в кристаллах  $TlA^{III}B_2^{VI}$ : автореф.

- дис. на соискание уч. степени докт. физ.-мат. наук / В.А. Алиев. – Баку, 1997. – 34 с.
12. Абдуллаев Н.А. Особенности теплового расширения слоистых кристаллов: автореф. дис. на соискание уч. степени канд. физ.-мат. наук / Н.А. Абдуллаев. – Баку, 1985. – 22 с.
  13. Ткаченко В.И. Энтальпии образования и теплоемкости соединений  $TlGaSe_2$  и  $TlGaS_2$  / В.И. Ткаченко, Ю.В. Ворошилов, Л.В. Костюков, А.М. Фантиц // Допов. АН УРСР, серия (Б), Геологические, химические и биологические науки. – 1980. – № 12. – С. 64 – 66.
  14. Годжаев Э.М. 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  $InTl_xGa_{1-x}Te_2$  ( $0 \leq x \leq 0.2$ ) / Э.М. Годжаев, Х.О. Садыгова // Изв. РАН, Неорганические материалы. – 1992. – Т. 28, № 10/11. – С. 2238 – 2241.
  16. Годжаев Э.М. Зонная структура  $TlInTe_2$  и термоэффективность твердых растворов на его основе / Э.М. Годжаев, Г.С. Джафарова, С.И. Сафарова // Термоэлектричество. – 2013. – № 1. – С. 28 – 33.
  17. Годжаев Э.М. Термоэлектрические свойства кристаллов  $TlIn_{1-x}Yb_xTe_2$  ( $0.01 \leq x \leq 0.04$ ) / Э.М. Годжаев, Р.А. Керимова // Изв. РАН, Неорганические материалы. – 2004. – Т. 40, № 11. – С. 1314 – 1316.
  18. G. Orudzhev, N. Mamedov, H. Uchiki, N. Yamamoto, S. Iida, H. Toyota, E. Gojaev, and F. Hashimzade, Band Structure and Optical Functions of Ternary Chain  $TlInSe_2$ , *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 64, 703 – 1706 (2003).
  19. E.M. Godzhayev, G.S. Orudzhev, R.A. Kerimova, and E.A. Allakhyarov, Band Structure and Optical Properties of Chained Compound  $TlInTe$ , *Physics of the Solid State* 48, 40 – 43 (2006).
  20. Годжаев Э.М. 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. G. Orudzhev, Y. Shim, K. Wakita, N. Mamedov, S. Jafarova, and F. Hashimzade, Linearized Augmented Plane Wave Band Structure Calculations and Dielectric Function of Layered  $TlGaSe_2$ , *Jap. J. of Applied Physics* 47 (10), 8182 – 8187 (2008).
  22. E.M. Godzhayev, Z.A. Dzhakhangirli, E.A. Allakhyarov, D.M. Kafarova, and A.R. Ibragimova, Cultivation, Phase Analysis and Band Structure of a Monocrystal of  $InGaTe$ , *Inorganic Materials* 47 (10), 1162 – 1165 (2011).
  23. E.M. Godzhaev, U.S. Abdurahmanova, Z.A. Dzhakhangirli, and 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. – М.: Высшая школа, 1987. – С. 7 – 42.
  25. Иоффе А.Ф. Избранные труды. Е.2 / А.Ф. Иоффе. – Л: Наука, 1975. – 468 с.
  26. F.D. Murnaghan, The Compressibility of Media under Extreme Pressures, *Proc. of the National Academy of Sciences* 30, 244 – 247 (1944).
  27. X. Gonze, B. Amadon, P.-M. Anglade, J.-M. Beuken, F. Bottin, P. Boulanger, F. Bruneval, et al., ABINIT: First-Principles Approach of Materials and Nanosystem Properties, *Computer Phys. Comm.* 180, 2582 – 2615 (2009).
  28. F. Birch, Finite Elastic Strain of Cubic Crystals, *Physical Review* 71, 809 – 824 (1947).

Поступила в редакцию 20.12.2013.