

Əlyazması hüququnda

ABDURƏHMANOVA ÜLKƏR SƏRDƏR qızı

**InGaTe₂ BİRLƏŞMƏSİNİN ZONA QURULUŞU,
ELEKTROFİZİKİ, İSTİLİK-FİZİKİ XASSƏLƏRİ VƏ
TƏTBİQOLUNMA İMKANLARI.**

2211.01 – Bərk cisimlər fizikası

**Fizika üzrə fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi
almaq üçün təqdim edilmiş dissertasiyanın**

A V T O R E F E R A T I

B A K İ – 2017

Dissertasiya işi Azərbaycan Texniki Universitetinin Fizika kafedrasında yerinə yetirilmişdir.

Elmi rəhbər: **Eldar Mehralı oğlu Qocayev**
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor

Rəsmi opponentlər: **Rauf Mədət oğlu Sərdarlı**
fizika- riyaziyyat elmləri doktoru, professor

Sədiyar Soltan oğlu Rəhimov
fizika üzrə elmlər doktoru

Aparıcı təşkilat: **Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti**
(Fizika kafedrası)

Müdafiə «__» _____ 2017-ci il saat ____ Bakı Dövlət Universitetinin nəzdində fəaliyyət göstərən D.02.012 Dissertasiya Şurasının iclasında keçiriləcəkdir.

Ünvan: AZ 1148, Bakı, Zəhid Xəlilov küçəsi 23, BDU, əsas bina, 437 saylı auditoriya

Dissertasiya ilə Bakı Dövlət Universitetinin Elmi kitabxanasında tanış olmaq olar.

Avtoreferat «__» _____ 2017-ci ildə göndərilmişdir.

D.02.012 Dissertasiya
Şurasının elmi katibi:

f.r.e.n., dos M.R. Rəcəbov

İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

Mövzunun aktuallığı: Optoelektronikanın, hesablama texnikasının, elektronikanın və digər sahələrin durmadan artan tələbatları yeni materialların alınmasını, onların keyfiyyətlərinin və funksional imkanlarının hərtərəfli və dərinlən öyrənilməsinə ön plana çəkir. Yeni sinif yarımkeçirici birləşmələrdə fiziki proseslərin kompleks şəkildə tədqiqi həmişə elmi praktiki əhəmiyyət kəsb etməklə, tədqiqatçıların xüsusi diqqətinə səbəb olmuşdur. Məhz bu səbəbdən də hələ keçən əsrin ortalarından etibarən TlSe qəfəsində Tl atomlarının özlərini fərqli, 3 və 1 valentli aparmalarına əsaslanaraq yeni sinif zəncirvari və laylı quruluşlu $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ tip birləşmələr alınmış, fiziki-kimyəvi və rentgenofaza analizləri ilə onların mövcud olmaları təsdiq edilmişdir. Sonrakı tədqiqatlarla müəyyən edilmişdir ki, göstərilən tip birləşmələr spesifik xüsusiyyətlərə malikdirlər. Bu onunla əlaqədardır ki, $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ tip birləşmələr xassələrinin anizotropluğu nəticəsində nadir fiziki və kimyəvi xassələrə malikdirlər. Bu kristallarda kimyəvi rabitənin anizotropluğu həmin birləşmələrin kristal qəfəslərinin də spesifik xüsusiyyətlərə malik olmasını şərtləndirir, optik, elektrik, istilik, fotoelektrik xassələrinin dəyişməsinə səbəb olur. Bu kristalların yüksək fotohəssaslığa, yaddaşlı çevirici xassəyə, yüksək tenzohəssaslığa malik olmaları sayəsində, onların əsasında rentgen diapazonunda işləyən çeviricilər, spektrin görünən və yaxın infraqırmızı oblastlarında işləyən fotoqəbuledicilər, yüksək həssaslığa malik olan təzyiq qeydediciləri və digər qurğular, onların elementləri hazırlanır.

Bu birləşmələrin daha bir dəyərli göstəriciləri onların xassələrinin kənar amillərdən- müxtəlif mənşəli şüalanmalardan, temperaturdan, mexaniki deformasiyadan, aşqarların təsirindən, elektromaqnit və səs dalğalarının təsirindən asılı olaraq idarə olunmasının mümkün olmasıdır.

Bu prinsiplərə əsaslanaraq hazırlanan qurğular mexaniki, elektrik və s. mənşəli olurlar. Onlar, geniş tətbiqolunma imkanlarına malik yaddaşlı çevirici xassələrinə əsaslanaraq hazırlanan yaddaş elementləridir. Göstərilən tip birləşmələrin daha bir qiymətli keyfiyyəti onların əsasında hazırlanmış tenzoelementlərin köməyiylə mexaniki deformasiya ilə əlaqədar müxtəlif dəyişiklikləri ölçməyə imkan verməsidir. $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ tip birləşmələrin əksəriyyətinin fiziki- kimyəvi analiz üsulları ilə mövcud olmaları təsdiq edilmiş, kristal və zona quruluşları hesablanmış, elektrofiziki, istilik- fiziki, optik, fotoelektrik, tenzometrik xassələri öyrənilmiş, yüksək foto və tenzohəssaslığa malik olmaları sübut edilmiş,

yeni tətbiqolunma imkanları araşdırılmışdır. Lakin göstərilən tip birləşmələrin nümayəndələrindən biri olan InGaTe_2 birləşməsi praktiki olaraq tədqiqatçıların diqqət mərkəzindən kənarda qalmışdır. Yalnız bu birləşmə barədə həm Respublikamızda, həm də xarici nüfuzlu jurnalların səhifələrində epizodik məlumatlar verilir. Amma InGaTe_2 birləşməsinin rentgenofaza analizi, zona və kristal quruluşlarının hesablanması, fundamental xassələrinin tədqiqi və bu birləşmənin tətbiqolunma imkanlarının aşkar edilərək tədqiq edilməsi xüsusi əhəmiyyət kəsb edir və tədqiqatçıları həmin istiqamətdə tədqiqat işi aparmağa ruhlandırır. Yəni InGaTe_2 birləşməsinin zona quruluşunun hesablanmasına, elektrofiziki, istilik-fiziki xassələri və tətbiqolunma imkanlarının araşdırılmasına həsr edilmiş dissertasiya işinin mövzusunun aktuallığı heç bir şübhə doğurmur.

İşin məqsədi. Müvafiq texnoloji rejim seçməklə InGaTe_2 birləşməsinin alınması, rentgenofaza analizi, elektron və istilik xassələrinin tədqiqi, enerji spektrinin və optik funksiyalarının hesablanması, kimyəvi rabitənin xarakterinin təyini, tətbiqolunma imkanlarının araşdırılmasıdır.

Qarşıya qoyulan məqsədə çatmaq üçün aşağıdakı məsələlərin həlli nəzərdə tutulmuşdur:

- Müvafiq texnoloji rejimlər seçilməklə InGaTe_2 birləşməsinin mükəmməl monokristalının yetişdirilməsi;
- InGaTe_2 birləşməsinin elektrofiziki, istilik- fiziki, optik və fotoelektrik xassələrinin kənar amillərin təsirindən asılı olaraq tədqiqinə imkan verən qurğuların yığılması;
- InGaTe_2 birləşməsinin səth quruluşunun tədqiqi və rentgenofaza analizi;
- InGaTe_2 birləşməsinin elektrik keçiriciliyinin, Holl, termo- e.h.q. və istidən genişlənmə əmsalının temperatur asılılıqlarının tədqiqinə əsasən fundamental yarımkeçirici parametrlərinin- qadağan olunmuş zonanın eni, yükdaşıyıcıların yürüklüyü, konsentrasiyası, keçiriciliyin tipinin təyin edilməsi;
- InGaTe_2 birləşməsində çevirmə effektinin və akustofotovoltaiik effektin tədqiqi;
- InGaTe_2 birləşməsinin optik və fotoelektrik xassələrinin tədqiqi;
- Müvafiq üsuldən istifadə etməklə InGaTe_2 birləşməsinin zona quruluşunun optik funksiyalarının dəşiklərin və elektronların effektiv kütlələrinin hesablanması;
- InGaTe_2 birləşməsinin tətbiqolunma imkanlarının araşdırılması.

İşin praktiki əhəmiyyəti. InGaTe₂ birləşməsində aşkar edilmiş çevirmə effektinə əsaslanaraq yaddaş elementlərinin, termoelementlərin və fotoçeviricilərin hazırlanması.

İşin elmi yenilikləri:

1. İlk dəfə olaraq sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsindən istifadə etməklə InGaTe₂ birləşməsinin enerji spektri, optik funksiyaları, elektronların və dəşiklərin effektiv kütlələri, qəfəs parametrləri hesablanmış, valent və keçirici zonaların mənşəyi təyin edilmişdir.
2. InGaTe₂ kristalının müxtəlif qalınlıqlı nümunələrində və müxtəlif temperaturalarda voltamper xarakteristikasının analizi ilə həmin birləşmənin yaddaşlı çevirici xassəyə malik olması aşkar edilərək tədqiq edilmişdir.
3. Həmin birləşmədə ilk dəfə olaraq akustofotovoltaiq effekt aşkar edilərək tədqiq edilmişdir;
4. Geniş tezlik və temperatur intervallarında InGaTe₂ birləşməsinin fotoelektrik xassələri tədqiq edilmiş, zonalararası keçidlərin xarakteri müəyyənəşdirilmiş, qadağan olunmuş zonanın eni hesablanmışdır.

Müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar:

1. InGaTe₂ birləşməsinin elektron və istilik xassələrinin kənar amillərin təsirindən asılı olaraq dəyişmə xarakteri;
2. InGaTe₂ birləşməsinin səth quruluşunun xüsusiyyətləri və rentgenofaza analizi;
3. Elektromaqnit və səs dalğalarının InGaTe₂ birləşməsinə təsirinin xarakteri;
4. Müxtəlif rejimlərdə və müxtəlif temperaturalarda InGaTe₂ birləşməsinin voltamper xarakteristikasının xüsusiyyətləri;
5. InGaTe₂ birləşməsinin zona quruluşu, valent və keçirici zonalarının mənşəyi, optik funksiyaların dəyişmə xarakteri;
6. InGaTe₂ birləşməsinin optik və fotoelektrik xassələrinin kənar amillərin təsirindən asılı olaraq dəyişmə xarakterləri;
7. InGaTe₂ birləşməsinin tətbiqolunma imkanları və tətbiqolunma sahələri.

İşin aprobasiyası: Dissertasiya işi aşağıdakı konfranslarda müzakirə olunub:

1. Akademik A.M. Əsgərovun 80 illik yubileyinə həsr olunmuş “Fizikanın aktual problemləri” Beynəlxalq elmi konfransı, Bakı, 6 dekabr, 2013;
2. “Mikroelektron çeviricilər və onların əsasında cihazlar” VII Beynəlxalq Elmi-Texniki Konfransı, Bakı-Sumqayıt 27-29 noyabr, 2013;

3. Azərbaycan xalqının ümummilli Lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 91-ci ildönümünə həsr olunmuş "Gənc Tədqiqatçıların I Beynəlxalq Elmi Konfransı, Bakı, 25-26 aprel, 2013;
4. Azərbaycan xalqının ümummilli Lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 91-ci ildönümünə həsr olunmuş "Gənc Tədqiqatçıların II Beynəlxalq Elmi Konfransı", Bakı, 18-19 aprel, 2014;
5. Azərbaycan xalqının ümummilli Lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 91-ci ildönümünə həsr olunmuş "Gənclər və elmi- texniki tərəqqi" mövzusunda tələbə və gənc tədqiqatçıların Respublika Elmi-texniki konfransı, Bakı, 5-7 may, 2014;
6. Yeni yüzilliyin nailiyyətləri və perspektivləri IV Beynəlxalq Praktiki Konfrans. XXI əsrin Elmi perspektivləri Beynəlxalq Praktiki Konfransı, Novosibirsk, 19-20 sentyabr, 2014;
7. Azərbaycan Respublikası Təhsil Nazirliyi Doktorantlar və Gənc Tədqiqatçıların XIX Respublika Elmi Konfransı, Bakı, 7-8 aprel 2015;
8. Azərbaycan xalqının Ümummilli Lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 92-ci ildönümünə həsr edilmiş Gənc Tədqiqatçıların III Beynəlxalq Elmi Konfransı, Qafqaz Universiteti, Bakı 17-18 aprel, 2015;
9. Opto-, nanoelektronika, kondensə olunmuş mühit və yüksək enerjilər fizikası IX Respublika Konfransı, BDU, Fizika problemləri İnstitutu, Bakı, 25-26 dekabr, 2015;
10. Azərbaycan xalqının Ümummilli Lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 93 illiyinə həsr edilmiş Gənc tədqiqatçıların IV Beynəlxalq Elmi Konfransı, Qafqaz Universiteti, Bakı, 29-30 aprel, 2016;
11. Professor T.M.Pənahovun 80 illik yubileyinə həsr olunmuş "Materiallar Fizikasının Müasir Problemləri" Beynəlxalq Elmi-praktiki Konfrans, Bakı, 10-11 iyun 2016.

Azərbaycan Texniki Universitetinin "Maşınqayırma" fakültəsinin Elmi Şurasında, Azərbaycan Texniki Universitetinin Fizika kafedrasının və "Nanostrukturların fizikası və texnikası" Elmi Tədqiqat laboratoriyasının Elmi seminarlarında müzakirə edilmişdir.

İşin publikasiyası: Dissertasiya işinin mövzusu üzrə 8-i xarici nüfuzlu jurnallarda olmaqla, 24 elmi məqalə çap olunmuşdur.

İşin quruluşu və həcmi: Dissertasiya girişdən, 4 fəsildən, əsas nəticələrdən və istifadə olunmuş ədəbiyyat siyahısından ibarətdir. İş şəkillərlə birlikdə 157 səhifədən, 39 şəkildən, 6 cədvəldən və 155 adda ədəbiyyatdan ibarətdir.

İşin qısa məzmunu:

Dissertasiya işinin **girişində** tədqiqatın mövzusunun aktuallığı əsaslandırılmış, məqsədi və əsas nəticələri formalaşdırılmış, nəticələrin elmi yenilikləri və işin praktiki əhəmiyyəti şərh edilmişdir. Dissertasiya işinin strukturu, sınağı və tədqiqatın nəticələri üzrə çap olunmuş əsərlər barədə məlumatlar verilmişdir.

Dissertasiya işinin **I fəslində** $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ tip üçqat birləşmələrin monokristallarının yetişdirilmə texnologiyalarına, rentgenostruktur analizlərinə, elektrofiziki, istilik-fiziki, optik, fotoelektrik, tenzorezistiv xassələrinin tədqiqinə həsr edilmiş işlərin təhlilinə, tətbiq olunma imkanlarının araşdırılmasına həsr edilmişdir.

Dissertasiya işinin **II fəslində** texnologiya məsələlərinin həllinə həsr edilmişdir. Burada InGaTe_2 birləşməsinin sintezi, monokristalının yetişdirilmə texnologiyası ətraflı şərh edilir. Alınmış monokristalın laueqramı çəkilmə və atom qüvvə mikroskopu ilə səthinin mikrorelyefi öyrənilmişdir. Birləşmənin rentgenofaza analizi ilə onun tetraqonal sinqoniyada kristallaşması, $D_{4h}^{18}(I4/mcm)$ fəza qəfəsinə malik olması aşkar edilmişdir. Fəslin sonrakı bölümlərində InGaTe_2 birləşməsində kinetik effektlərin, istidən genişlənmə əmsalının temperatur asılılıqlarını tədqiq etməyə imkan verən qurğular və parametrlərin ölçmələrində yol verilən xətlər barədə yığcam məlumatlar verilmişdir. Birləşmənin voltamper xarakteristikasının, akustofotovoltaik effektin, fotoelektrik və optik xassələrinin tədqiq olunmasında istifadə olunan üsullar **şərh olunmuşdur**.

Dissertasiya işinin **III fəslində** InGaTe_2 birləşməsinin xüsusi elektrik keçiriciliyinin, Holl və termo- e.h.q. əmsallarının temperatur asılılıqlarının tədqiqinin nəticələri verilmişdir. Birləşmənin fundamental yarımkeçirici parametrləri: qadağan olunmuş zonanın eni, sərbəst yükdaşıyıcıların konsentrasiyası, yürüklüyü, keçiriciliyin tipi təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, birləşmə p- tip keçiriciliyə malikdir, xüsusi elektrik keçiriciliyinin, Holl və termo- e.h.q. əmsallarının temperatur asılılıqları bir-biri ilə yaxşı uzlaşır. Holl yürüklüyünün temperaturdan asılı olaraq dəyişməsi $T^{-3/2}$ qanunu üzrə baş verir ki, bu da InGaTe_2 birləşməsində yükdaşıyıcıların əsasən uzununa akustik fononlardan səpilməsini göstərir. Bu fəsilə **həmçinin** 80÷350 K temperatur intervalında InGaTe_2 birləşməsinin istidən genişlənmə və izotermik sıxılma əmsalının temperatur asılılıqlarının tədqiqinin nəticələri verilmişdir. Həmin parametrlərin eksperimental qiymətlərinə əsasən birləşmənin istilik-fiziki parametrləri:

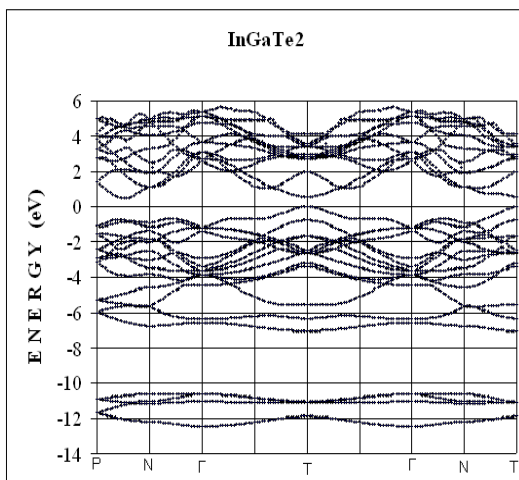
entropiyanın, entalpiyanın və Gibbs enerjisinin dəyişmələri, sabit təzyiqdə və sabit həcmdə istilik tutumları fərqi, Debay temperaturu təyin edilmişdir.

Məlum olduğu kimi kristalların energetik zonalarının hesablanması materialın fiziki- kimyəvi xassələrinin öyrənilməsi üçün nəzəri bazis rolunu oynayır. Bunu nəzərə alaraq müvafiq proqram paketi vasitəsilə və sıxlıq funksionalı metodundan istifadə etməklə InGaTe_2 birləşməsinin zona quruluşu hesablanmışdır.

Sıxlıq Funksionalı Nəzəriyyəsi yaxınlaşmasında LAPW metodundan istifadə edərək WIEN2k proqramlar paketi vasitəsilə InGaTe_2 kristalının Brillüen zonasının simmetrik nöqtələri və xətləri üzrə elektron zona quruluşu təyin olunmuş və alınan nəticələr təhlil edilmişdir. Mübadilə-korrelyasiya potensialı kimi Ümumiləşdirilmiş Qradient Aproximasiyasından (GGA) istifadə olunmuşdur. Bu məqsədlə əvvəlcə qəfəs parametrləri və atom koordinatları enerjinin və Helman– Feynman qüvvələrinin minimuma gətirilməsi vasitəsilə ilk prinsiplərdən (ab-initio) təyin olunmuşdur. InGaTe_2 -nin zona quruluşunu hesablamaq üçün qəfəs parametrlərinin optimallaşdırılmış qiymətləri $a=8.3945 \text{ \AA}$; $c=6.8352 \text{ \AA}$, halkogen parametri $x=0.1730$ götürülmüşdür.

InGaTe_2 birləşməsinin elektron spektrinin hesablanması Brillüen zonasının Γ , T, N, P simmetrik nöqtələrində, həmçinin həmin nöqtələri birləşdirən düz xətlər üzrə aparılmışdır. Hesablamanın nəticələri şəkil 1-də verilib.

Şəkildən görünür ki, InGaTe_2 birləşməsinin valent zonası üç yarımzonadan ibarətdir. Ən aşağı yarımzona digərlərindən $\sim 6\text{eV}$ aralıda yerləşmiş 4 zonadan əmələ gəlmişdir. Nəzəri – qrup analizi göstərir ki $-11 \text{ eV} \div -10 \text{ eV}$ ətrafında yerləşmiş bu zonalar tellur atomlarının 5s- hallarından yaranır (formalaşır), 4 zonadan ibarət sonrakı qrup -5 eV səviyyədə yerləşib, indium və qallium



Şəkil 1. InGaTe_2 birləşməsinin zona quruluşu

atomlarının s- hallarından yaranır. Eni 5 eV-a bərabər olan 10 zonadan ibarət olan qrup In, Ga və Te atomlarının p- hallarından yaranır. Bu birləşmənin fotoemission spektri öyrənilərək müəyyən edilmişdir ki, fotoemission spektrində üç kəskin ifadə olunmuş maksimum müşahidə edilir. -4 eV ətrafındakı pik Ga-Te rabitəsinə, -5÷0 eV ətrafındakı pikləri isə Ga-Ga və Ga-Te piklərinə aid etmişlər ki, bu da bizim nəzəri- qrup analizi ilə yaxşı uzlaşır.

InGaTe₂ birləşməsinin elektrik keçiriciliyinin, termo-e.h.q. əmsalının və istilik keçiriciliyinin temperatur asılılıqlarına əsasən termoeffektivlik əmsalları təyin edilmiş və bu birləşmənin 600÷900 K temperatur intervalında termoelektrik material kimi istifadə oluna bilməsi aşkar edilmişdir. İlk dəfə olaraq Murnaqaan hal tənliyindən istifadə etməklə InGaTe₂ birləşməsinin elementar qəfəsinin minimal həcmi və ondan istifadə edərək qəfəs parametrləri hesablanmış, alınmış qiymətlərin cüzi kənara çıxma ilə qəfəs sabitlərinin eksperimental qiymətləri ilə üst- üstə düşməsi müəyyən edilmişdir. InGaTe₂ birləşməsinin elektron və dəşiklərinin effektiv kütlələrinin tərs qiymətlərinin tenzoru da hesablanmışdır. Məlum olduğu effektiv kütlədən elektrik və maqnit xassələrinin öyrənilməsində, kinetik parametrlərin hesablanmasında və kritik nöqtələrdə optik parametrlərin analizində istifadə edilir.

LAPW metodu ilə hesablanmış zona quruluşuna əsasən InGaTe₂ birləşməsində elektronların və dəşiklərin effektiv kütlələri hesablanmışdır. Bu məqsədlə valent və keçirici zonalarının ekstremumları, elektronların və dəşiklərin tərs effektiv kütlə tenzorları təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, keçirici zonadakı minimum $k_0=0.125b_1+0.125b_2+0.375b_3$ nöqtəsində yerləşir; halın dalğa funksiyası D_1 gətirilməyən təsvirlə dəyişir. Elektronların və dəşiklərin effektiv kütlə tenzorlarının tərs qiymətlərinin komponentləri 0.01 m_0 dəqiqliklə hesablanmışdır. Bu hala uyğun elektronların tərs effektiv kütlə tenzorunun komponentləri aşağıdakı kimidir:

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

Valent zonasının maksimumu Brillüen zonasının $k_0=0.5b_1-0.5b_2+0.5b_3$ nöqtəsində yerləşir. Energetik halın dalğa funksiyası T_3 -gətirilməyən təsvirlə dəyişir. Dəşiklərin tərs effektiv kütlə tenzorlarının komponentləri,

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

kimidir.

Məlum olduğu kimi elementar qəfəslərin vəziyyətləri müəyyən V_0 tarazlıq həcmələri ilə müəyyən edilirlər və bu həcmənin azacıq dəyişməsi ilə kristalın tam enerjisi dəyişir. Bu asılılıq Murnaqaq düsturu adlanan düsturla ifadə edilir.

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

Burada $E_0 = E(V_0)$ tarazlıq həcminə müvafiq enerjidir (yəni enerjinin minimum qiymətidir). $B = -V(\delta P / \delta V)_T$, B - həcmi sıxılma modulu, B_0 - həcmi sıxılma modulunun tarazlıq halındakı qiymətidir ($P=0$ olduqda). B'_0 isə onun sabit temperaturda təzyiqə görə birinci tərtib törəməsidir. Tənliyə daxil edilmiş $\frac{1}{147036}$ tənliyin tam enerjinin nəticələrinin Ridberqlə ifadə

edilməsini təmin edir. Kristal qəfəsin parametrlərini təyin etmək üçün elementar qəfəsin həcmi $\pm 8\%$ dəyişərək tam enerjinin müvafiq qiymətlərini hesablamışıq.

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

Elementar qəfəsin həcmənin hesablanmış qiymətlərinə görə $V_0 = 6268.1419$ a.u., $B = 40.2392$ GPa, onun təzyiqə görə törəməsi $B' = 4.5588$ olmuşdur.

Qeyd edək ki, tarazlıq halında qəfəs parametrlərinin hesablanması onların c/a nisbətlərinin sabitliyi halında aparılmışdır. Qəfəs parametrlərinin

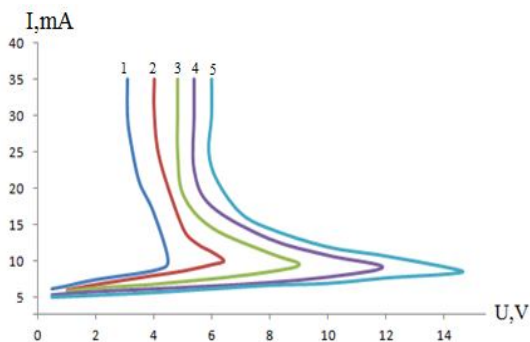
nəzəri hesablanmış və eksperimental üsulla təyin edilmiş qiymətləri bir-biri ilə yaxşı uzlaşır. Bu fəsilə InGaTe_2 birləşməsinin müxtəlif

Qəfəs parametrləri	InGaTe ₂ birləşməsi	
	Qəfəs parametrlərinin LAPW üsulu ilə hesablanmış qiymətləri	Qəfəs parametrlərinin eksperimental qiymətləri
$a, \text{\AA}$	8.409	8.412
$c, \text{\AA}$	6.871	6.875
x	0.174	0.173

temperaturalarda və statik rejimdə voltamper xarakteristikasının nəticələri barədə məlumatlar verilmişdir. InGaTe_2 birləşməsinin voltamper xarakteristikası $7 \times 1 \times 1 \text{ mm}^3$ ölçülü monokristallarda aparılmışdır. Kontakt kimi In və Cu-dan istifadə edilmişdir. Kontaktların keyfiyyəti nümunənin müqavimətinin dəfələrlə ölçülməsi ilə yoxlanılmışdır. Nümunədən cərəyanın keçməsi InGaTe_2 birləşməsinin monokristalının c oxu üzrə baş vermişdir.

80, 200, 250, 300, 350 K temperaturalarında aparılmış tədqiqatların nəticələri şəkil 2-də verilmişdir. Şəkil 2-dən göründüyü kimi gərginliyin kiçik qiymətlərində $I(U)$ asılılığı xətti, müqavimət omikdir.

Gərginliyin artması ilə $I(U)$ xətti asılılığı yox olur və xarakteristika qeyri-xətti olmaqla S-ə bənzər forma alır. Aşkar edilmişdir ki, omik oblastda nümunənin temperaturu sabit qalır, amma mənfi diferensial müqavimət oblastında nümunənin temperaturu adətən ətraf mühitin temperaturundan yüksək olan T- temperaturuna qədər artır. Yüksək cərəyanlarda S-ə bənzər xarakteristikanın mənfi diferensial müqavimət oblastı daha aydın ifadə olunur. Alınmış nəticələrin təhlili göstərir ki, diferensial müqavimət oblastı aşağı



Şəkil 2. Müxtəlif temperaturalarda InGaTe_2 birləşməsinin voltamper xarakteristikası: 1-350 K; 2-300 K; 3-250 K; 4-200 K; 5-80 K

temperaturalarda kəskin ifadə olunur, nümunələrin aşağı keçiricilikli haldan yüksək keçiricilikli hala keçməsi sıçrayışla baş verir. $I(U)$ əyrisinin mənfi diferensial müqavimət oblastında hər bir nöqtədə nümunənin temperaturu onun səthinə birləşdirilmiş termoelement vasitəsilə ölçülmüşdür. Nümunənin temperaturunun ondan keçən cərəyanın şiddətindən asılılığı da tədqiq edilmişdir. Temperatur artdıqca elektrik keçiriciliyi də artdığından kanallardan cərəyanın keçməsi təmin olunur.

Dissertasiya işinin **IV fəslində** InGaTe_2 birləşməsinin $e||c$, $e \perp c$ polyarlaşmaları halında optik sabitlərinin; dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin, udma və qaytarma əmsallarının, sındırma əmsalının həqiqi və xəyali hissələrinin, enerji itkisinin xəyali hissəsinin, optik elektrik

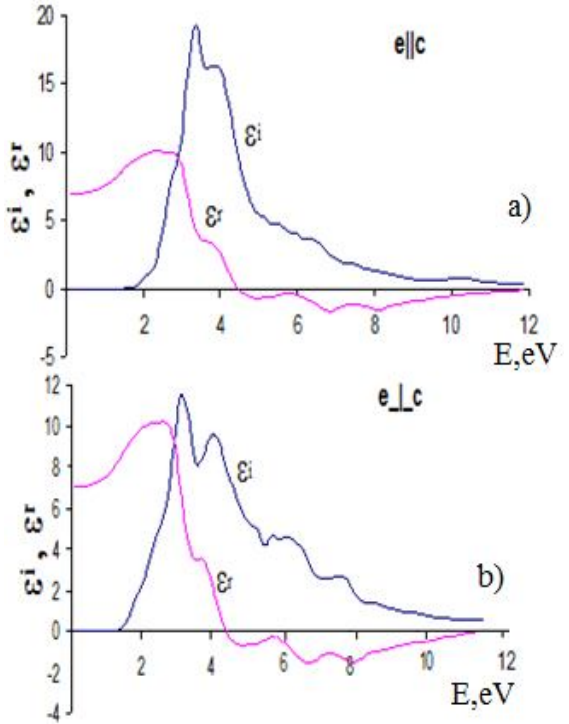
keçiriciliyinin xəyali və həqiqi hissələrinin hesablamalarının nəticələri öz əksini tapmışdır (şəkil 3). Bu fəsilə həmçinin ilk dəfə olaraq InGaTe₂ monokristalında optik udulma və fotokeçiricilik effektləri tədqiq edilmiş, udma sərhəddi, aşqarların aktivləşmə enerjisi, qadağan olunmuş zonanın eni hesablanmış və onun qiymətinin digər yollarla hesablanmış qiymətlərlə yaxşı uzlaşması müəyyən edilmişdir.

InGaTe₂ birləşməsinin optik sabitlərini müəyyən etmək üçün verilmiş polyarlaşma halında 0÷6 eV enerji intervalında $\varepsilon_i(E)$ asılılığını ≈ 0.2 eV addımla hamar histoqram şəklində qurulmuş, $\varepsilon_r(E)$ asılılığı isə Kramers-Kroniq analizi aparmaqla təyin edilmişdir. 6 eV-dan yüksək enerjilərdə $\varepsilon_i(E)$ asılılığı məlum $\varepsilon_i(E)|_{E \rightarrow \infty} \approx E^{-3}$ düsturu ilə ekstrapolyasiya edilmişdir. Dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsi Kramers-Kroniq integral dispersion münasibəti ilə hesablanmışdır.

$$\varepsilon_r(E) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} E' \varepsilon_i(E') \cdot \frac{dE'}{E'^2 - E^2},$$

Burada P- simvolu ilə integralın baş qiyməti ifadə edilir. Histoqram 0.2 eV addımla qurulmuş və 12 eV enerjili bütün $\nu \rightarrow c$ zonalararası keçidləri əhatə etmişdir. Müəyyən kiçik quruluşdan etibarən histoqramda 12 eV ətrafında $\varepsilon_i(E)$ asılılığı məlum $\varepsilon_i(E)|_{E \rightarrow \infty} \sim E^{-3}$ düsturuna görə ekstrapolyasiya edilmişdir.

Dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin hesablanmış qiymətlərindən istifadə etməklə $e||c$ və $e \perp c$ polyarlaşmasında sındırma əmsalının həqiqi və xəyali hissələri, qaytarma əmsalı, xarakterik enerji

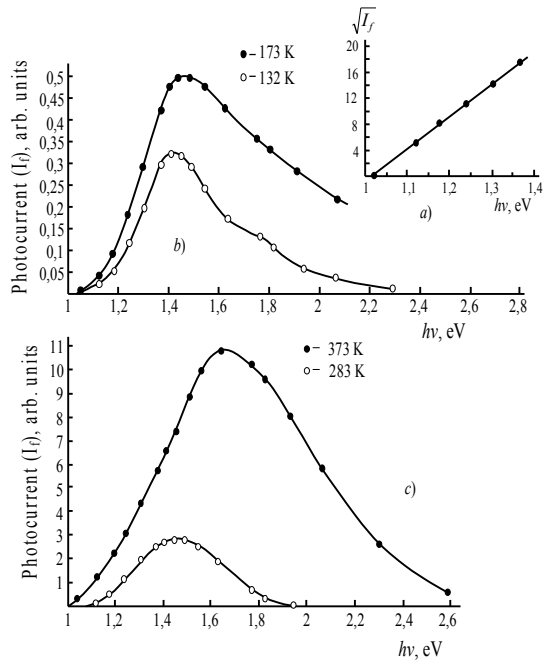


Şəkil 3. $e \perp c$ və $e || c$ polyarlaşma hallarında InGaTe₂ birləşməsinin dielektrik sabitlərinin həqiqi (a) və xəyali (b) hissələrinin spektral asılılığı

itkisi funksiyası, elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələri hesablanmışdır. $\varepsilon_i(E)$ spektrində hər iki polyarlaşma halında əsas zolağın maksimumları 3.15 eV enerjisində müşahidə edilir. Bunu biz valent zonasının yuxarı hissəsindən keçirici zonanın aşağı hissəsinə keçidlə əlaqələndiririk. $\varepsilon_i(E)$ spektrində $e \perp c$ polyarlaşma halında 4.02, 5.9, 6.2 və 7.47 eV enerjilərində daha 4 pik müşahidə edilmişdir. $e \parallel c$ polyarlaşma halında ε_i -maksimal qiymətini 15.1-də, $e \perp c$ polyarlaşma halında isə 12.8-də alır. Bu fərqli kəskin anizotropluğa malik zəncirvari InGaTe₂ tip kristallar üçün xarakterik əlamət sayılır. $\varepsilon_r(E=0)$ -in $e \parallel c$ polyarlaşması halında maksimum qiyməti 7.88, $e \perp c$ polyarlaşma halında isə 7.21-dir. InGaTe₂ birləşməsində lazer şüalanmasının təsiri ilə meydana çıxan generasiya-rekombinasiya proseslərinin eksperimental tədqiqi, onların optoelektronikada tətbiq olunma imkanları baxımından xüsusi maraq kəsb edir. InGaTe₂ birləşməsinin fotoelektrik xassələri monokristal külçəsindən $6 \times 3 \times 1$ mm³ ölçüsündə kəsilmiş nümunələrində aparılmışdır. Kristalın işıqlandırılması onun c kristalloqrafik oxu istiqamətində aparılmışdır.

InGaTe₂ kristalı p- tip keçiriciliyə malik olub monokristalın yetişdirilmə rejimindən asılı olaraq ($1 \cdot 10^3 \div 1 \cdot 10^6$) Om·sm intervalında dəyişən xüsusi müqavimətə malik olmuşlar. Kontakt olaraq gümüş pastasından istifadə edilmişdir.

InGaTe₂ kristalının fotokeçiricilik spektri 132÷370 K temperatur intervalında tədqiq edilmişdir. Nəticələr Şəkil 4-də verilib. Fotocərəyanın spektri kifayət qədər geniş, 1.2 eV-dan 2.6 eV-a qədər enerji intervalını əhatə edir. Kristalların fotonəssaslıqları temperaturun artması ilə qanunauyğun olaraq artır. Şəkindən



Şəkil 4. Müxtəlif temperaturda InGaTe₂ birləşməsinin fotokeçiricilik spektrləri

göründüyü kimi, fotocərəyan spektrlərinin uzun dalğalı sərhəddi Moss kriteriyasına tabe olmur. $I_f(h\nu)$ asılılığına görə InGaTe₂ birləşməsində optik keçidlərin xarakterləri müəyyən edilmişdir. $I_{\phi}^{1/2} \sim h\nu$ miqyasında uzundalğalı sərhəddində ekperimental nöqtələrin bir xətt üzrə yerləşməsi bu kristalda 1.02 eV enerjili çəp keçidlərin mövcud olmasını göstərir (Şəkil 4 a). InGaTe₂ kristalının fotohəssaslığının maksimumu enerjinin 1.42 eV qiymətinə uyğun gəlir. InGaTe₂ kristalının fundamental udma oblastında yüksək fotohəssaslığa malik olması həmin kristalda düz optik keçidlərin mövcud olmasını göstərir.

InGaTe₂ birləşməsinin fotoelektrik xassələrinin tədqiqi zamanı aşkar edilmişdir ki, kristal eyni zamanda bir-birinə perpendikulyar istiqamətdə yönəlmiş səs və elektromaqnit dalğalarının təsirinə məruz qaldıqda kristalın onlara perpendikulyar üzləri arasında e.h.q. yaranır. Akustofotovoltaiik effekt adlanan bu effektin tədqiq olunması aşağıdakı qaydada aparılmışdır. Tədqiqat qalınlığı 0.4 mm, eni 1.3 mm olan elektrodları arasındakı məsafə 0.6 mm olan monokristalda aparılmışdır. Bu zaman nümunə səs mənbəyi üzərində yerləşdirilir və həmin nümunə səs dalğalarına perpendikulyar istiqamətdə elektromaqnit dalğalarının təsirinə də məruz qalır. Sinyal xüsusi qurğu vasitəsilə yazılır. Müəyyən edilmişdir ki, nümunə yalnız elektromaqnit və ya yalnız səs dalğalarının təsirinə məruz qaldıqda onun uclarında yerləşdirilmiş elektodlar arasında e.h.q. müşahidə edilmir. Aşkar edilmişdir ki, meydana çıxan AFV effekt işığın intensivliyindən və spektral tərkibindən, həmçinin səsin tezliyindən və amplitudundan asılıdır, kristalı işıqlandırmamaq və ya akustik dalğanın təsirini götürməklə bu effekti sıfıra qədər azaltmaq mümkündür.

DİSSERTASIYANIN ƏSAS NƏTİCƏLƏRİ

1. Müvafiq texnoloji rejim seçməklə InGaTe₂ birləşməsinin monokristal yetişdirilmiş, atom qüvvə mikroskopu ilə səthinin mikroyəfəfi öyrənilmiş və rentgenofaza analiz üsulu ilə qəfəs parametrləri təyin edilərək bu birləşmənin tetraqonal sinqoniyada kristallaşması müəyyən edilmişdir.
2. InGaTe₂ birləşməsinin elektrofiziki və istilik – fiziki xassələrinin temperatur asılılıqlarının tədqiqinə əsasən onun yarımkeçirici parametrləri– qadağan olunmuş zonasının eni, sərbəst yükdaşıyıcıların konsentrasiyası, yürüklüyü, keçiriciliyin tipi və istilik– fiziki– entropiyanın, entalpiyanın, daxili enerjinin dəyişmələri, sabit təzyiqdə

və sabit həcmdə istilik tutumları fərqi, Debay temperaturu təyin edilmişdir.

3. İlk dəfə olaraq sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsindən istifadə etməklə InGaTe_2 birləşməsinin zona quruluşu hesablanmış və müəyyən edilmişdir ki, InGaTe_2 birləşməsinin valent zonası üç yarımzonadan ibarətdir. Ən aşağı yarımzona digərlərindən $\sim 6\text{eV}$ aralıda yerləşmiş 4 zonadan əmələ gəlmişdir. Nəzəri – qrup analizi göstərir ki, $-11\text{ eV} \div -10\text{ eV}$ ətrafında yerləşmiş bu zonalar tellur atomlarının 5s hallarından yaranır, 4 zonadan ibarət sonrakı qrup -5 eV səviyyədə yerləşib, indium və qallium atomlarının s– hallarından yaranır. Eni 5eV – a bərabər olan 10 zonadan ibarət olan qrup In, Ga və Te atomlarının p – hallarından yaranır.
4. Aşkar edilmişdir ki, InGaTe_2 birləşməsi yaddaşlı çevirici xassəyə malikdir və çevirmənin baş verdiyi astana gərginliyini temperaturun dəyişdirilməsi ilə idarə etmək mümkündür.
5. Zona quruluşu hesablamalarının nəticələrinə əsaslanaraq elektronların və dəşiklərin effektiv kütlələri, müxtəlif polyarlaşmalar halında InGaTe_2 birləşməsinin optik xassələri - dielektrik nüfuzluğu, udma, qaytarma, sındırma əmsalları, optik elektrik keçiriciliyinin həqiqi və xəyali hissələri təyin olunmuşdur.
6. Optik və fotoelektrik xassələrinin tədqiqi ilə InGaTe_2 birləşməsinin qadağan zolağının eni, həmçinin birləşmədəki aşqarların aktivləşmə enerjiləri təyin olunmuşdur. InGaTe_2 birləşməsinə eyni zamanda bir–birinə perpendikulyar istiqamətdə səs və elektromaqnit dalğalarının təsiri nəticəsində meydana çıxan AFV effektin tədqiqi ilə spektral xarakteristikanın səs və elektromaqnit dalğalarının tezliklərinin dəyişdirilməsi ilə idarə olunmasının mümkünlüyü aşkar edilmişdir.

Dissertasiya işinin mövzusunə aid çap olunmuş elmi işlərin siyahısı:

1. Годжаев Э.М., Алиева П.Ф., Абдурахманова У.С., Рагимов Р.С., Исмаилов А.А. Расчет зонной структуры и оптический функций тройных соединений $\text{InGaSe}_2, \text{InGaTe}_2$ / Материалы VIII Международного Симпозиума фундаментальные и прикладные проблемы науки, Москва, 2013, Том 1, с. 59–66.
2. Годжаев Э.М., Абдурахманова У.С., Алиева П.Ф. Расчет зонной структуры и оптических функций тройных соединений $\text{InGaSe}_2, \text{InGaTe}_2$ / Академик А.М. Əsgərovun 80 illik yubileyinə həsr olunmuş

“Fizikanın aktual problemləri” Beynəlxalq elmi konfransının materialları, 6 dekabr, Bakı, 2013, səh. 134–135.

3. Qocayev E.M., Abdurəhmanova Ü.S., Əliyeva P.F. InGaSe₂(Te₂) birləşmələrinin zona quruluşlarının hesablanması / Материалы VII Международной научно–технической конференции «Микроэлектронные преобразователи и приборы на их основе», 27–29 ноября, Баку–Сумгаит, 2013, с. 22–25.
4. Godzhayev E.M., Abdurahmanova U.S. Thermal expansion and isothermal compressibility of InGaTe₂ compound // Azerbaijan Journal of Physics Fizika, 2013, vol.XIX, №4, Baki, pp.22–24.
5. Qocayev E.M., Abdurəhmanova Ü.S. Zəncirvari kristallik quruluşlu InGaTe₂ birləşməsinin faza analizi və elektron spektri // Journal of Qafqaz University–Physics, 2013. vol. 1, Number 2, Bakı, pp. 137–141.
6. Abdurəhmanova Ü.S. InGaTe₂ birləşməsinin zona quruluşu / Azərbaycan xalqının ümumilli Lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 91–ci ildönümünə həsr olunmuş "Gənc Tədqiqatçıların I Beynəlxalq Elmi Konfransının" materiallar toplusu, 25–26 aprel, Bakı, 2013, səh. 278–279.
7. Qocayev E.M., Abdurəhmanova Ü.S. InGaTe₂ birləşməsinin istilik–fiziki parametrlərinin təyini // Elmi əsərlər, Fundamental elmlər, 2013, cild 2, №2, Bakı, səh. 60–65.
8. Qocayev E.M., Abdurəhmanova Ü.S., Ramazanzadə A.M. Üçqat InGaTe₂ birləşməsinin elektrofiziki xassələri // Milli Aviasiya Akademiyası Elmi məcmuələr, 2013, Bakı: cild 15, №4, səh. 72–77.
9. Godzhayev E.M., Abdurahmanova U.S. Phase analysis and electrophysical properties of InGaTe₂ // Journal of Thermoelectricity №2, 2014, Ukraina, pp. 29–39.
10. Abdurəhmanova Ü.S. InTe–GaTe sisteminin hal diaqramı / Azərbaycan xalqının ümumilli Lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 91–ci ildönümünə həsr olunmuş "Gənc Tədqiqatçıların II Beynəlxalq Elmi Konfransının" materiallar toplusu, 18–19 aprel, Bakı, 2014, səh. 46–48.
11. Abdurəhmanova Ü.S. InGaTe₂ birləşməsinin alınma texnologiyası / Azərbaycan xalqının ümumilli Lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 91–ci ildönümünə həsr olunmuş “Gənclər və elmi–texniki tərəqqi” mövzusunda tələbə və gənc tədqiqatçıların Respublika Elmi–texniki konfransının materialları, 5–7 may, Bakı, 2014, səh. 468–469.
12. Qocayev E.M., Cahangirli Z.A., Abdurəhmanova Ü.S. InGaTe₂ birləşməsinin qəfəs parametrlərinin, elektron və dəşiklərinin effektiv

kütlələrinin hesablanması // Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Xəbərləri, Bakı, 2014, №2, səh. 54–59.

13. Godzhayev E.M., Dzhakhangirli Z.A., Abdurahmanova U.S., Mehdieva Sh.M. Optical functions, band structure and effective masses of electrons and holes in InGaTe_2 . // Open Journal of Inorganic Non-Metallic Materials, USA, April 2014, vol.4, pp. 13–20.
14. Годжаев Э.М., Абдурахманова У.С., Мамедова С.И. Структура и физические свойства соединения InGaTe_2 . / IV международно-практическая конференция научные перспективы XXI века. Достижения и перспективы нового столетия Международный научный институт Новосибирск, 19-20 сентября 2014, №4, часть 2, с.134–137.
15. Годжаев Э.М., Абдурахманова У.С., Алиева П.Ф. Акустофотовольтаический эффект в монокристаллах InGaTe_2 и InGaSe_2 // Радиотехника. 2014. вып. 178, ISSN 0485–8972, с.52–58.
16. Qocayev E.M., Cahangirli Z.A., Abdurəhmanova Ü.S., Ramazanzadə A.M., Alieva P.F. $\text{InGaSe}_2(\text{Te}_2)$ birləşmələrinin zona quruluşları, atom koordinatlarının və qəfəs parametrlərinin hesablanması // Azərbaycan Hava yolları QSC Milli Aviasiya akademiyası, Elmi Məcmuələr 2014, cild 16, № 3, ISSN1811–7341, səh. 38–42.
17. Годжаев Э.М., Абдурахманова У.С., Кулиева С.О. Вольтамперная характеристика InGaTe_2 // Известия Томского политехнического университета 2015, т.326, №5, с. 131–138.
18. Abdurəhmanova Ü.S. InGaTe_2 birləşməsində yaddaşlı çevirmə effekti / Azərbaycan Respublikası Təhsil Nazirliyi Doktorantlar və Gənc Tədqiqatçıların XIX Respublika Elmi Konfransı, 7-8 aprel, Bakı, 2015, səh. 32–34.
19. Gojayev E.M., Kazim-zade A.G., Salmanov V.M., Guseynov A.G., Abdurahmanova U.S. Mamedov R.M. Electrical and Photoelectric Properties of Crystal InGaTe_2 // Physical Science International Journal, 2015, vol.8, №2: Article no.PSIJ.18553 ISSN: 2348–0130, pp. 1–8.
20. Abdurəhmanova Ü.S. InGaTe_2 birləşməsinin rentgenofaza analizi / Azərbaycan xalqının Ümummilli Lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 92-ci ildönümünə həsr edilmiş Gənc tədqiqatçıların III Beynəlxalq Elmi Konfransı, Qafqaz Universiteti, Bakı, 17-18 aprel 2015, səh. 49–51.
21. Э.М.Годжаев, М.А. Рамазанов, З.А. Джахангирли, У.С. Абдурахманова, П.Ф.Алиева Получение и рентгенофазовый анализ соединений InGaTe_2 и InGaSe_2 // Bakı Universitetinin

xəbərləri, 2015, Fizika –Riyaziyyat elmləri seriyası, №1. ISSN 1609–0586, səh. 109–118.

22. Ü.S. Abdurəhmanova, P.F. Əliyeva InGaSe_2 və InGaTe_2 birləşmələrinin qəfəs parametrlərinin, elektron və dəşiklərin effektiv kütlələrinin hesablanması / BDU–nın Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş “Opto, nanoelektronika, kondensə olunmuş mühit və yüksək enerjilər fizikası” Beynəlxalq konfransı, 25–26 dekabr, Bakı, 2015, səh. 144–147.
23. E.M.Qocayev, Ü.S. Abdurəhmanova InGaTe_2 birləşməsinin kinetik effektlərinin tədqiqi / Azərbaycan xalqının Ümummilli Lideri Heydər Əliyevin anadan olmasının 93– cü illiyinə həsr edilmiş Gənc tədqiqatçıların IV Beynəlxalq Elmi Konfransı, 29–30 aprel, Bakı, 2016, Qafqaz Universiteti, səh. 59-61.
24. Ü.S. Abdurəhmanova InGaTe_2 birləşməsinin faza analizi, elektrofiziki xassələri və enerji spektri / Professor T.M.Pənahovun 80 illik yubileyinə həsr olunmuş “Materiallar Fizikasının Müasir Problemləri” Beynəlxalq Elmi-praktiki Konfransın materialları, 10-11 iyun, Bakı, 2016, səh. 125-132.

**ЗОННАЯ СТРУКТУРА, ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ,
ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ВОЗМОЖНОСТИ
ПРИМЕНЕНИЯ СОЕДИНЕНИЯ InGaTe_2
Абдурахманова Улькер Сардар кызы**

РЕЗЮМЕ

Диссертационная работа посвящена комплексному исследованию тройного соединения InGaTe_2 . В данной работе разработана соответствующая технология и выращены монокристаллы данной фазы. Исследовались микрорельеф поверхности монокристаллов InGaTe_2 , рентгенофазовым анализом определены параметры тетрагональной ячейки. Рассчитана коэффициент термоэффективности и выявлено, что в определенном температурном интервале InGaTe_2 обладает высоким коэффициентом термоэффективности. Исследованы вольтамперная характеристика в статическом режиме и при различных температурах выявлено, что данная фаза обладает переключающими свойствами с памятью. Пороговое напряжение управляется с изменением температуры окружающей среды. Методом LAPW рассчитана зонная структура InGaTe_2 и выявлено, что данное соединение является прямозонным полупроводником и роль составляющих атомов в формировании валентной зоны и зоны проводимости. Используя минимального значения полной энергии теоретически определены параметры решетки и выявлено, что эти значения хорошо согласуются с их экспериментальными значениями. Определены эффективные массы электронов и дырок. В работе излагаются результаты исследования эффекта обнаруженного при одновременном и перпендикулярном воздействии электромагнитных и звуковых волн. Характер спектральной зависимости эффекта управляется с изменением частоты падающего света. Исследованы оптические и фотоэлектрические свойства монокристалла InGaTe_2 , определены энергии активации примесей, ширина запрещенной зоны, область спектральной чувствительности. Определены реальные и мнимые части диэлектрической проницаемости, коэффициенты преломления, поглощения, отражения и характеристическая функция потерь энергии при различных поляризациях.

**THE BAND STRUCTURE, ELECTROPHYSICAL, THERMAL
PROPERTIES AND APPLICATION POSSIBILITIES OF
COMPOUND InGaTe₂
Abdurahmanova Ulker Sardar**

SUMMARY

Dissertation is devoted to the complex study of InGaTe₂ compound. In this thesis a corresponding technology is developed and single crystals of this phase are grown. The microrelief of surface of InGaTe₂ compound was studied, and the tetragonal cell parameters were determined by X-ray phase analysis. Calculated thermal efficiency coefficient and revealed that in a certain temperature range InGaTe₂ has a high thermal efficiency coefficient. Investigated current-voltage characteristic in static mode and it is revealed that in different temperatures this phase has switching properties with memory. The threshold voltage is controlled with a changing environment temperature. Using the pseudopotential method, taking into account its non-locality, the band structure of InGaTe₂ was calculated and it was revealed that this compound is a direct-gap semiconductor and the role of constituent atoms in the formation of the valence band and the conduction band. Using the minimum value of the total cell energy, the lattice parameters were theoretically determined and it was found that this value is in good agreement with their experimental values. Effective masses of electrons and holes are determined. The dissertation presents the results of an investigation of the effect of electromagnetic and sound waves detected at a simultaneous and perpendicular action. The nature of the spectral dependence of the effect is controlled with a change in the frequency of the incident light. The optical and photoelectric properties of compound InGaTe₂ were studied, the activation energies of the impurities, width of band structure and the spectral sensitivity region were determined. With the real and imaginary parts of the permittivity coefficients of refraction, absorption, reflection and the characteristic function of energy loss are determined for different polarization.

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ
АЗЕРБАЙДЖАНСКОЙ РЕСПУБЛИКИ**

БАКИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Улькер Сардар кызы Абдурахманова

**ЗОННАЯ СТРУКТУРА, ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ,
ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ВОЗМОЖНОСТИ
ПРИМЕНЕНИЯ СОЕДИНЕНИЯ InGaTe_2**

2211.01 - Физика твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

**диссертации на соискание ученой степени
доктора философии по физике**

Б А К У - 2017