

TƏMƏL PRİNSİPLƏRDƏN TlSe VƏ TlInSe₂ KRİSTALLARI ÜÇÜN HAL TƏNLİYİ PARAMETRLƏRİNİN TƏYİNİ

V. CƏFƏROVA¹, S. HƏMİDOV¹, S. SCHORR², H. ORUCOV¹,
Z. CAHANGİRLİ¹, N. MƏMMƏDOV¹

¹Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının akademik H.M.Abdullayev adına
Fizika İnstitutu, H.Javid 33, Bakı, Az-1143, Azərbaycan,

²Hahn-Meitner- Institute, Gliniker Str. 100, D-14109, Berlin, Germany.

e-mail: vina246@rambler.ru

Təməl prinsiplərdən ABINIT proqramlar paketi və LAPW metodu istifadə olunmaqla TlSe və TlInSe₂ – in kristal quruluşu optimizasiya olunmuşdur. Bu kristal quruluşların Murnaghan və Birch-Murnaghan hal tənliklərinin bütün parametrləri təyin edilmişdir.

Используя расчеты из первых принципов в рамках пакетов программ ABINIT и LAPW оптимизированы кристаллические структуры TlSe и TlInSe₂. Определены все параметры уравнений Мурнагана и Бирч-Мурнагана, описывающих равновесное состояние этих кристаллических структур.

The crystal structures of TlSe and TlInSe₂ were optimized using first principle calculations within ABINIT and LAPW program packages. All parameters of Murnaghan and Birch-Murnaghan equations defying the equilibrium state of the above crystal structures are determined.

Tədqiq olunan TlSe, TlInSe₂ yarımkəçirici birləşmələri tetraqonal sinqoniyada kristallaşır və zəncirvari quruluşa malikdirlər. Bu quruluşda üçüncü qrup elementləri fərqli kristalloqrafik vəziyyətlər tutur: atomların yarısı zəncirlər arasında, digər yarısı isə zəncirlərdə yerləşirlər. Bu səbəbdən TlSe –in quruluş formulunu TlTlSe₂ şəklində yazırlar.

Zəncirlər arasında duran üçüncü qrup atomları təpələrində səkkiz Se atomu olan bir qədər deformasiya olunmuş və azacıq burulmuş kubların mərkəzində yerləşir. Digər üçüncü qrup atomlar isə Se atomlarından ibarət tetraedrlərin mərkəzində durur və onları əhatə edən halkogen atomları ilə birlikdə $\langle \begin{smallmatrix} Se \\ Se \end{smallmatrix} \rangle Tl_{II} \langle \begin{smallmatrix} Se \\ Se \end{smallmatrix} \rangle Tl_{II} \langle \begin{smallmatrix} Se \\ Se \end{smallmatrix} \rangle$ tipli zəncirlər əmələ gətirir. TlSe və TlInSe₂ -in quruluş tipi B37, qəfəsi həcməmərkəzləşmiş tetraqonal, fəza simmetriya qrupu $D_{4h}^{18}(I4/mcm)$ - dir [1]. TlSe tip kristalların kristal quruluşu haqqında geniş məlumat əvvəlki işlərdə verilmişdir [2-4].

[5]-də ABİNİT proqramlar paketi ilə (Hartwigsen-Goedecker-Hutter (HGH) və Troullier-Martins (TM) psevdopotensialları istifadə olunmaqla) təməl prinsiplərdən (tam enerjinin minimuma gətirilməsi yolu ilə) TlSe kristalının tarazlıq qəfəs parametrləri a, c həmçinin halkogen parametri x hesablanmışdır. Təqdim olunan işdə təməl prinsiplərdən WIEN2k proqramlar paketi [6] ilə LAPW metodu istifadə olunmaqla TlSe və TlInSe₂ kristalları üçün a, c, x quruluş parametrləri hesablanmış, Murnaghan [7] və Birch-Murnaghan [8] hal tənliklərinin parametrləri (həcmi deformasiya modulu – B₀, onun təzyiqlə görə birinci tərtib törəməsi B₀') təyin edilmişdir. TlSe kristalı üçün qəfəs və halkogen parametrlərinin LAPW metodu ilə hesablanmış qiymətləri cədvəl 1-də gətirilmişdir. Müqayisə üçün həmin cədvəldə [5]-də alınmış nəzəri nəticələr, həmçinin eksperimental nəticələr və onların eksperimental qiymətlərdən fərqi faizlərlə verilmişdir.

TlInSe₂ kristalı üçün LAPW metodu ilə alınmış nəzəri nəticələr cədvəl 2-də verilmişdir.

Cədvəl 1.

TlSe üçün LAPW metodu ilə hesablanmış qəfəs və halkogen parametrləri

Parame tr	LAPW		Psp [5]	HGH	Psp [5]	HGH(d)	Psp TM [5]		Eksp. [1]
a, Å	8.184	2 %	7.794	2.8 %	7.814	2.6 %	8.436	5.2 %	8.02
c, Å	7.143	2 %	6.630	5.3 %	6.884	1.7 %	7.319	4.5 %	7.00
x	0.183	2.3%	0.179	0.3 %	0.186	3.9 %	0.179	0.4 %	0.179
	4		5				8		

Cədvəl 2.

TlInSe₂ üçün LAPW metodu ilə hesablanmış qəfəs və halkogen parametrləri

Parametr	LAPW		Eksp. [9]
a, Å	8.176	1.24 %	8.075
c, Å	6.933	1.24 %	6.847
x	0.1756	2.4 %	0.1714

Yuxarıdakı cədvəllərdən görünür ki, TlSe və TlInSe₂ kristalları üçün müxtəlif metodlarla hesablanmış kristal parametrlərinin qiymətləri eksperimental qiymətlərlə yaxşı uyğunluq təşkil edir.

Aşağıda hal tənliyi və onun parametrləri haqqında məlumatlar verilmişdir. Məlumdur ki, kristala xaricdən təzyiç göstərdikdə o deformasiyaya uğrayır. Bu zaman həm qəfəs parametrləri, həm də atomların yerini təyin edən parametrlər dəyişir. Ona görə də təzyiçin (deformasiyanın) verilmiş qiymətində bu parametrləri hesablamaq vacib məsələlərdəndir. Hesab edilir ki, təzyiç tam enerjinin həcmə

görə (sabit entropiyada) $P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S$ (1) və həcmi deformasiya modulu isə təzyiçdən həcmə görə (sabit temperaturda) $B = -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T$ (2) törəmələri ilə təyin olunur. Eksperimentdə həcmi deformasiya modulunun təzyiçə görə törəməsi $B' = \left(\frac{\partial B}{\partial P}\right)_T$ (3) təzyiçin kiçik dəyişməsinə görə tapılır. Əgər $B' = B'$ olduğunu qəbul etsək onda $B = B_0 + B_0'P$ olacaq, burada B_0 $P = 0$ olduqda B -nin qiymətidir. Beləliklə, həcmnin dəyişməsi təzyiçin dəyişməsilə aşağıdakı şəkildə ifadə olunur:

$$\frac{dV}{V} = -\frac{dP}{B_0 + B_0'P} \quad (4)$$

(4) ifadəsini inteqrallasaq nəticədə

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

və buradan da

$$V(P) = V_0 \left(1 + B_0' \frac{P}{B_0} \right)^{-1/B_0'} \quad (6)$$

alırıq, burada V_0 -kristalın elementar özəyinin tarazlıq həcmidir.

Kristal üçün tam enerjinin həcmdən asılılığı hal tənliyi adlanır. Murnaghan hal tənliyi [7] :

$$E(V) = E_0 + \left[\frac{B_0 V}{B_0'} \left(\frac{V_0/V}{B_0' - 1} + 1 \right) - \frac{B_0 V}{B_0' - 1} \right] \frac{1}{14703.6} \quad (7)$$

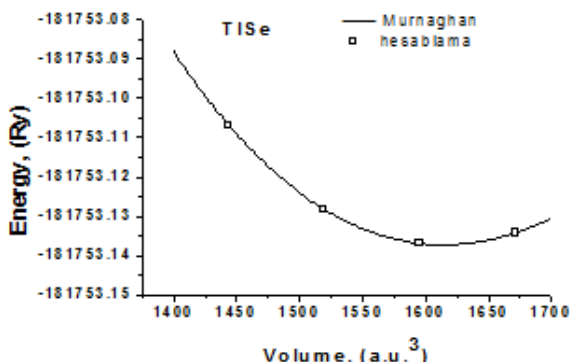
Birch-Murnaghan hal tənliyi [8] isə,

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0 B_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^3 B_0' + \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \right\} \frac{1}{14703.6} \quad (8)$$

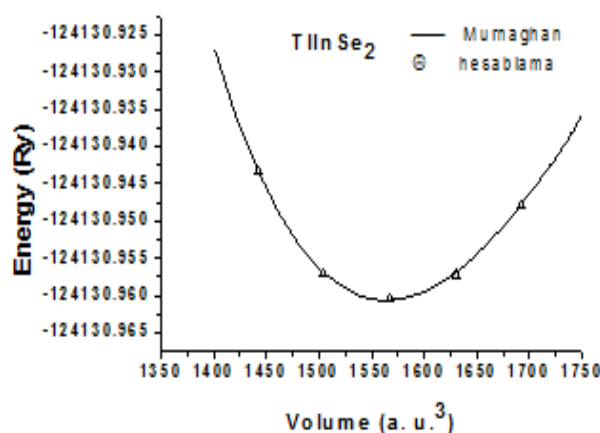
şəklində ifadə olunur. [8] tənliyindən təzyiçin həcmdən asılılığı tapılır:

$$P(V) = \frac{3B_0}{2} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{7}{3}} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{5}{3}} \right] \left\{ 1 + \frac{3}{4} (B_0 - 4) \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right] \right\} \quad (9)$$

Hesablamalardan Murnaghan və Birch-Murnaghan hal tənliklərini TlSe və TlInSe₂ kristalları üçün ödəyən parametrlər V_0 , B_0 və B_0' təyin edilmişdir (Cədvəl 3.). TlSe və TlInSe₂ kristalları üçün hesablamaqdan alınmış və Murnaghan hal tənliyinə görə təyin edilmiş tam enerjinin həcmdən asılılıq qrafikləri aşağıdakı şəkillərdə verilmişdir.



Şəkil 1. TlSe üçün tam enerjinin həcmdən asılılığı. Δ -hesablama, bütöv xətt - Murnaghan hal tənliyi



Şəkil 2. TlInSe₂ üçün tam enerjinin həcmdən asılılığı. Δ -hesablama, bütöv xətt - Murnaghan hal tənliyi

Həm Murnaghan, həm də Birch-Murnaghan hal tənlikləri vasitəsilə hesablanmış enerjinin həcmdən asılılıq əyriləri böyük dəqiqliklə üst-üstə düşür.

TlSe və TlInSe₂ kristalları üçün Murnaghan və Birch-Murnaghan hal tənliklərini ödəyən parametrlər.

Parametr	TlSe		TlInSe ₂	
	Murnaghan	Birch - Murnaghan	Murnaghan	Birch - Murnaghan
V ₀ (a.u.)	1614.0134	1613.9421	1563.7689	1563.7281
E ₀ (Ry)	-181753.137254	-181753.137249	-124130.960679	-124130.960694
B ₀ (GPa)	45.4423	45.3972	43.2963	43.1549
B ₀ '	1.4129	1.5863	6.6170	6.6508

- [1]. *J.Ketelaar, W.t'Hart, R.Moorel et al.* The crystal structure of TlSe, thallos thallic or thallosic selenide // *Z. Kristallogr.*, 1939, v.101A, p.396-404.
- [2]. *S.Ellialtioglu, E.Mete, R.Shaltaf, K.Allakhverdiyev, F.Gashimzade, M.Nizametdinova, G. Orudzhev* Electronic structure of a chain-like compound TlSe, *Phys. Rev.*, 2004, v.B70, p.195118-1-6
- [3]. *И. В. Алексеев* Гетерепереход на полупроводниках с цепочечной структурой TlSe-TlInSe₂ // *ФТП*, 1998, том 32, выпуск 5, с. 588-590
- [4]. *H.S.Orucov, V.N.Cəfərova*, TlSe birləşməsinin fonon spektri. "Fizikanın actual problemləri", IV Respublika Elmi Konfransının materialları, Bakı-2006.
- [5]. *V.N.Cəfərova*, İlk prinsiplərdən zəncirvari TlSe birləşməsinin tam enerjisinin və kristal parametrlərinin hesablanması, Azərbaycan MEA aspirantlarının elmi konfransının materialları, Bakı-«ELM»-2006
- [6]. *K. Schwarz, P. Blaha, G. K. H. Madsen*, Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material science, *Computer Physics Communications*, 2002, 147, vol. 71
- [7]. *F.D.Murnaghan*, 'The Compressibility of Media under Extreme Pressures', in *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 1944, vol.30, pp.244-247
- [8]. *Francis Birch*, 'Finite Elastic Strain of Cubic Crystals', in *Physical Review*, 1947, vol.71, pp. 809-824
- [9]. *D.Müller, G. Eulenberger, and H.Hahn*, Über ternäre Thalliumchalkonide mit thallium selenide structures // *Z. anorg. allg. Chem.*, 1973, v. 398, pp. 207-220