

CdGa₂Te₄ KRİSTALININ DİNAMİK XASSƏLƏRİNİN AB-INITIO TƏDQIQI

Z.A. CAHANGİRLİ^{1,2,*}, B.Q. MEHDİYEV^{1,2}, R.G. SEYİDOV¹, T.O. BAYRAMOVA²

¹AR Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu, AZ-1073, Bakı, Azərbaycan

²AR Elm və Təhsil Nazirliyi BDU, AZ-1148, Bakı, Azərbaycan

³ Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti, Azadlıq pr., 16/21, Bakı, Azərbaycan

*zakircahangirli@yahoo.com

CdGa₂Te₄ yarımkeçirici kristalının dinamik xassələri Həyəcanlaşma Sıxlıq Funksionalı nəzəriyyəsi (DFPT) istifadə edilərək tədqiq olunmuşdur. Səkkiz Raman aktiv və on iki infraqırmızı (İQ) aktiv modları qrup-simmetriya analizindən istifadə etməklə identifikasiya olunmuşdur. Nəzəri olaraq hesablanmış nəticələr ədəbiyyatdakı eksperimental nəticələrlə müqayisə edilmişdir.

Açar sözlər: CdGa₂Te₄, Raman, İQ aktiv modlar, fonon dispersiyası, PDOS.

PACS: 63.20.dk, 74.25.Kc

1. Giriş

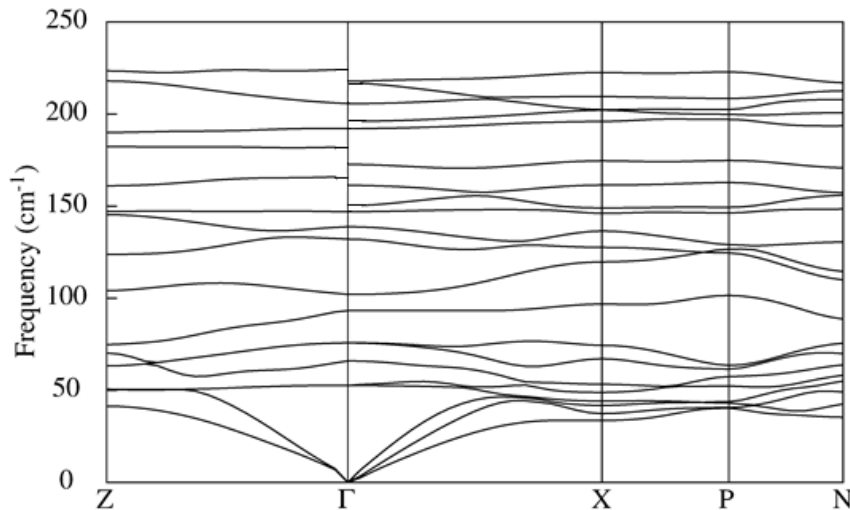
A^{II}B₂^{III}C₄^{VI} üçlü birləşmələri elektrooptik, opto-elektron və qeyri-xətti optik cihazlarda istifadə üçün perspektivli sayıldığı üçün tədqiqatçıların diqqətini cəlb edir [1]. Bu birləşmələrə optik anizotropiya, ikiqat şüasınma, böyük qeyri-xətti həssaslıq əmsalları, yüksək fətohəssaslıq kimi xüsusiyyətlər xasdır. Bu xüsusiyyətlərin mövcudluğu, eləcə də geniş qadağan olunmuş zona bu birləşmələri yarımkeçirici cihazların hazırlanmasında perspektivli materiallar sırasına çıxarır [1]. Buna görə də, bu birləşmələrin fiziki xüsusiyyətlərinin tədqiqi mühümdür. Bu məqalədə CdGa₂Te₄ kristalının dinamik xassələrinin nəzəri tədqiqatının nəticələri təqdim olunur.

2. CdGa₂Te₄-ün dinamik xassələri

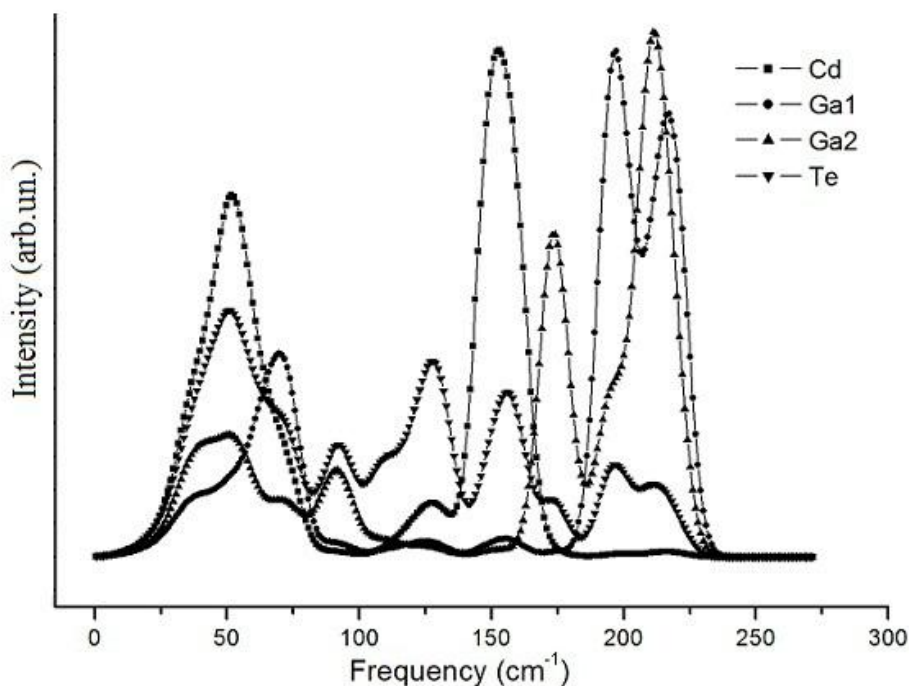
Ab-initio hesablamaları DFPT [2-4] vasitəsilə həyata keçirilmişdir. Hesablamalar ABINIT kodunda reallaşdırılmış psevdopotensial metodu ilə aparılmışdır [5]. CdGa₂Te₄ kristalının primitiv qəfəsində 7 atom var və fonon spektri buna görə 21 normal moddan ibarətdir.

Qrup nəzəriyyəsi analizi aşağıdakı fonon modlarını verir: $\Gamma=3A+6B+6E$, akustik modlar: $\Gamma_{\text{acoustic}}=B+E$ və optik modlar: $\Gamma_{\text{optic}}=3A+5B+5E$. E simmetriyalı modlar ikiqat cırlaşmışdır. Bütün optik modlar Raman aktivdir, B və E modları isə həmçinin infraqırmızı (İQ) spektrlərdə aktivdir. A modları qeyri-polyar Raman aktiv modlardır, B və E modları polyar modlardır və buna görə LO-TO parçalanma göstərir. A modlarında atomlar əsasən kristalloqrafik x, y və z oxları boyunca hərəkət edir. B modlarında isə kation qəfəsi ilə anion alt qəfəsi arasındakı hərəkət əsasən tetragonal c oxu boyunca baş verir. Ex və Ey simmetriyalı modların hərəkəti əsasən c oxuna perpendikulyar ab müstəvisində baş verir.

CdGa₂Te₄ kristalının fonon modlarının dispersiyası Brilluen zonasının yüksək simmetriyalı xətləri boyunca şəkil 1-də göstərilmişdir. Şəkil 1-dən görünür ki, P-N xətti istisna olmaqla, bütün yüksək simmetriyalı istiqamətlərdə optik fononların dispersiyası əhəmiyyətsizdir, bu da xüsusilə tetragonal c oxu boyunca Γ -Z istiqamətində zəif atomlararası qarşılıqlı təsiri göstərir. İQ aktiv B və E modları Brilluen zonasının mərkəzində LO-TO parçalanmasına səbəb olur və spektrdə qırılmalar kimi görünür (şəkil 1).



Şəkil 1. CdGa₂Te₄ kristalının fonon spektri.



Şəkil 2. CdGa₂Te₄ kristalının atomlara proyeksiya edilmiş fonon sıxlığı.

Cədvəl 1.
CdGa₂Te₄ üçün hesablanmış və eksperimentdən alınmış İQ və Raman fonon tezlikləri

CdGa ₂ Te ₄		
$\omega_{\text{theo}}, \text{cm}^{-1}$	$\omega_{\text{exp}}, \text{cm}^{-1}$	
	IR	R
102 132 138.8		132
63.4 90.2 161.2 172.6 228.1	58/77 98 140 182 220/237	64 85 114 234
52.6 75.8 150.2 197 215.1	78 140 201 213	162 203
50.1 75.8 146.9 192 205.6	155	57

İzostruktur birləşmələrin CdGa₂Se₄ [6], CdGa₂S₄ [7] və CdGa₂Te₄ fonon spektrlərinin müqayisəsi göstərir ki, bütün birləşmələrdə fononların dispersiyasının xarakteri ümumilikdə üst-üstə düşür. İki mühüm fərqi vurğulamaq olar: birincisi, anionun atom kütləsinin azalması ilə uyğun optik modların əlavələri azalır, ikincisi, kation və anion atomları arasındakı böyük kütlə fərqi natiçəsi olan enerji aralıqları CdGa₂S₄-də böyükdür, CdGa₂Se₄-də azalır və CdGa₂Te₄-də yox olur. Həmçinin, xalkogenlərin vibrasiya payı atom kütləsi artdıqca (S, Se, Te) aşağı tezliklərə doğru sürüşür.

Atomlara proyeksiya edilmiş fonon sıxlığı (PDOS) Şəkil 2. də göstərilmişdir. Hər bir atom üçün PDOS-un təhlili göstərir ki, 0 ilə 60 sm⁻¹ tezlik aralığında maksimumu 50 sm⁻¹ olan B və E modları ilə akustik və aşağı tezlikli optik budaqlar Cd və Te atomlarının hərəkətini əhatə edir. 85-dən 170 sm⁻¹-ə qədər olan ikinci tezlik aralığı, əsasən, Cd atomunun vibrasiyası ilə əlaqəlidir, Te-un isə az miqdarda payı var. Bu aralıqda Ga atomları fonon vibrasiyalarında iştirak etmir. Qeyd etmək lazımdır ki, Cd atomları yalnız 20-85 sm⁻¹ və 140-170sm⁻¹ tezlik diapazonlarında vibrasiyalarda iştirak

edir. Orta tezliklərdə onların payı demək olar ki, yoxdur. Yüksək tezlikli üçüncü sahə əsasən kristalloqrafik mövqelərdə (2b) və (2c) olan Ga atomlarının hərəkəti ilə bağlıdır. Spektrin 132 cm^{-1} -dəki ən güclü piki yalnız anion Te atomlarının iştirak etdiyi A modasına uyğundur. Aşağı tezlikli və yüksək tezlikli sahələr əsasən B və E modalarına uyğundur, halbuki qeyri-polyar A modaları orta tezlik intervalında yerləşir.

Cədvəl 1-də CdGa_2Te_4 üçün hesablanmış fonon tezlikləri və IQ və KR spektrləri verilmişdir. Cədvəldən

görüldüyü kimi, nəzəri və eksperimental tezliklər kifayət qədər uyğundur.

3. Nəticə

Hesablama nəticələri göstərir ki, aşağı və yüksək tezlikli enerjilər əsasən B və E modlarına uyğun gəlir, orta tezlikli modlar isə qeyri-polyar A modları ilə bağlıdır. Ən intensiv spektral pik 132 cm^{-1} tezliyindədir və Te anionlarının stexiometrik vakansiya ətrafında simmetrik hərəkətinə uyğundur.

-
- [1] *A.H. Georqobiani, C.I. Radaucan, I.M. Tiginyanu.* ФТП, 19, 193, 1985.
- [2] *P. Gianozzi, S. de Gironcoli, P. Pavone, S. Baroni.* Phys. Rev. B, 43, 7231. 1991
- [3] *S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, P. Gianozzi.* Rev. Mod. Phys. 73, 515, 2001.
- [4] *X. Gonze.* Phys. Rev. B, 55, 10337 (1997)
- [5] *X. Gonze, J.M. Beuken, R. Caracas, F. Detraux, M. Fuchs, G.M. Rignanese, L. Sindic, M. Verstraete, G. Zerah, F. Jallet.* Comput. Mater. Sci. 25, 478 (2002)
- [6] *З.А. Джахангирли, Т.Г. Керимова, Н.А. Абдуллаев, И.А. Мамедова, Н.Т. Мамедов.* ФТП, 51, в.5, 585 (2017)
- [7] *З.А. Джахангирли, Т.Г. Керимова, И.А. Мамедова, Н.А. Абдуллаев, Н.Т. Мамедов.* ФТТ, 60,11, 2265, 2018.

Z.A. Jahangirli, B.G. Mekhtiev, R.G. Seidov, T.O. Bayramova

Ab INITIO INVESTIGATION OF THE DYNAMIC PROPERTIES of CdGa_2Te_4

The dynamic properties of CdGa_2Te_4 have been investigated using density functional theory (DFT). Eight Raman-active modes and twelve IR-active modes were discovered and identified by considering the point group symmetry. The theoretically calculated results are compared with the experimental data of this study and with the available experimental data from the literature, obtained by infrared spectroscopy and Raman scattering methods.

З.А. Джахангирли, Б.Г. Мехтиев, Р.Г. Сеидов, Т.О. Байрамова

Ab INITIO ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ CdGa_2Te_4

Динамические свойства CdGa_2Te_4 исследованы с использованием теории функционала плотности (DFT). Восемь Раман активных мод и двенадцать ИК активных мод были обнаружены и идентифицированы из рассмотрения точечной группы симметрии. Теоретически рассчитанные результаты сравнены с экспериментальными данными настоящей работы и с результатами имеющихся в литературе экспериментальными данными, полученными методами инфракрасной спектроскопии и комбинационного рассеяния света.