

# HİPOTETİK HEKSAQONAL KRİSTALLİK QURULUŞLU InTe KRİSTALININ TƏZYİQ ALTINDA DAYANIQLIĞI.

**B.H. MEHDİYEV**

*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası, H.M. Abdullayev adına Fizika İnstitutu,  
AZ 1143, Bakı şəhəri, H.Cavid pr. 131  
[bachschi@yahoo.de](mailto:bachschi@yahoo.de)*

Heksaqonal kristallik quruluşlu  $\beta$ -InTe kristalın entalpiyasının təzyiqdən asılılığı nəzəri olaraq hesablanmışdır. Həmin hesablamalar məlum tetraqonal kristallik quruluşlu InTe kristalı üçün də aparılmış və göstərilmişdir ki, sıfır temperatur və təzyiqin (-4,+4) GPa qiymətləri arasında hekxaqonal quruluş daha dayanıqlıdır.

**Açar sözlər:** Heksaqonal InTe, entalpiya, təməl prinsiplər, sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi

**PACS:** 71.15.Mb, 71.15.Nc

## GİRİŞ

İndiumun halkoginidləri ümumiyyətlə bir neçə kristallik quruluş, o cümlədən tetraqonal, romboedrik, kubik, ortorombik, monoklinik və hekxaqonal quruluş nümayiş etdirirlər [1,2]. InTe kristalının isə adı şəraitdə yalnız tetraqonal quruluşa malik olması məlumdur. Lakin ədəbiyyatda [3] müəlliflər belə bir fərziyyə irəli sürüblər ki, InTe hekxaqonal quruluşda ola bilər. İlkin prinsiplərdən aparılmış hesablamalarla müəlliflər [3] göstərmişlər ki, InTe kristalının tam enerjisi hekxaqonal fazada tetraqonal fazasındakından cüzi artıqdır və beləliklə metastabil hekxaqonal faza ( $\beta$ -InTe) prinsipcə mümkündür. Bizim üçün maraqlı olan bir sualı, hansı şəraitdə hekxaqonal InTe tetraqonal InTe –dan daha dayanıqlıdır, cavablaşdırmaq üçün bu işdə bir də araşdırma aparmışıq və hər iki kristallik quruluş üçün entalpiyanı hesablamışıq. Aldığımız nəticələr hekxaqonal InTe kristalının sıfır temperaturda təzyiqin müəyyən qiymətləri arasında daha dayanıqlı olmasını sübut edir.

## KRİSTALLİK STRUKTUR

### A. TETRAQONAL InTe

Ədəbiyyatdan məlumdur ki, InTe tetraqonal T1Se tipli zəncirvari quruluşa malik yarımkəçiricidir və fotoelektrik xassələrinə görə fotoqəbuledici cihazlarda istifadə oluna bilər. Tetraqonal InTe kristalında In atomları iki fərqli mövqelərdə yerləşir.  $In^{3+}$  ionları 4 qonşu  $Te^{2-}$  ionları ilə əhatə olunur.  $In^{1+}$  ionları isə 8 qonşu  $Te^{2-}$  ionları ilə əhatə olunur. Tutduqları mövqelər kristalloqrafik nöqtəyi-nəzərdən tamam fərqli olduğundan, elektronlar  $In^{1+}$  ionundan  $In^{3+}$  ionuna sərbəst keçə bilmir [4]. Tetraqonal InTe kristalının fəza qrupu  $I4/mcm - D_{4h}^{18}$ , No.140 [5,6].

Atomların elementar özəydə tutduqları mövqeləri (Vitskof mövqeləri):

$In^{1+}$  4(a) (0, 0, 1/4) (0, 0, 3/4) ;

$In^{3+}$  4 (b) (0, 1/2, 1/4) (1/2, 0, 1/4);

Te 8 (h) (x, 1/2+x, 0) (-x, 1/2 -x, 0) (1/2 -x, x, 0) (1/2 +x, -x, 0)

Qəfəs parametrləri və Vitskof mövqelərinin parametri:  $a = 8.4522 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.1327 \text{ \AA}$ ,  $x=0.1824$  [4].

### B. HEKSAQONAL InTe

Heksaqonal InTe laylı quruluşa malikdir. Hər lay 4 atom müstəvisindən (Te-In-In-Te) ibarətdir.  $\beta$  -InTe kristalının elementar özəyinə 2 lay daxildir. Kristalın fəza qrupu  $P6_3/mmc - D_{6h}^4$ , No.194. Bütün atomların elementar özəydə tutduqları mövqeləri (Vitskof mövqeləri):  $4(f) \pm (1/3, 2/3, z) \pm (1/3, 2/3, 1/2 - z)$ . Qəfəs parametrləri və Vitskof mövqelərinin parametri:  $a = 4.05 \text{ \AA}$ ,  $c = 16.93 \text{ \AA}$ ,  $z (In) = 0.1710$ ,  $z (Te) = 0.6016$  [3].

### HESABLAMA METODU

Hesablamalardan əvvəl qəfəs parametrləri və elementar özəkdə atomların tarazlıq vəziyyətindəki mövqeləri Hellmann-Feynman qüvvələrinin minimalaşdırılması şərtindən müəyyən edilmişdir. Minimalaşdırma psevdopotensial yanaşmada müstəvi dalğalar bazisində sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsinin lokal sıxlıq yaxınlaşması əsasında ABİNİT proqramlar paketi [7] vasitəsilə aparılmışdır. Norma qoruyan Hartvigsen-Goedekker-Hutter [8] psevdopotensiallarından istifadə edilmişdir. Tam enerjinin kifayət qədər dəqiqliklə hesablanmasını təmin etmək üçün dalğa funksiyası maksimal kinetic enerjisi 40 Ha olan müstəvi dalğalar bazisində sıraya ayrılmışdır. Brillüyen zonasının (BZ) üzərində inteqrallama Monkhorst-Pak sxemi [9] vasitəsilə tetraqonal InTe üçün (8 8 8) bölümlə,  $\beta$  -InTe üçün isə (12 12 3 ) bölümlə aparılmışdır. Minimalaşdırma əməliyyatı qüvvələrin qiymətlərinin  $10^{-8}$  Ha/ Bohr qədər azaldana qədər davam etdirilmişdir. Elementar özəyin (e.ö.) tam enerjisi  $10^{-12}$  eV dəqiqliklə hesablanmışdır. Minimalaşdırandan sonra alınmış parametrlər tetraqonal InTe üçün :  $a = 8.454 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.152 \text{ \AA}$ ,  $x = 0.1868$ , hekxaqonal InTe üçün:  $a = 4.262 \text{ \AA}$ ,  $c = 17.0828 \text{ \AA}$ ,  $z (In) = 0.1721$ ,  $z (Te) = 0.5947$ .

### NƏTİCƏLƏR VƏ MÜZAKİRƏ

Optimallaşdırılmış parametrlər vasitəsilə hesablanmış tam enerjinin elementar özəyin həcmindən asılılıqları  $\beta$  - InTe və tetraqonal InTe üçün şəkil 1 və şəkil 2-də nöqtələrə göstərilmişdir. Həmin şəkillərdə nöqtələri birləşdirən bütöv əyriyə Birç – Murnağan tənliyindən [8,9] alınan əyriyədir.

$$E_{tot}(V) = E_{tot}(V_0) + (BV/B_P(B_P - 1)) \left( B_P(1 - V_0/V + V_0VBP-1) \right) \quad (1)$$

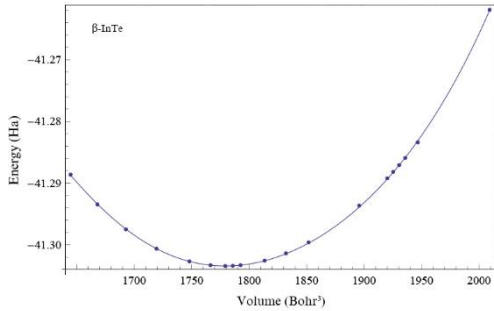
Əyrinin minimumu sıfır təzyiqlə və temperaturda tarazlıq halı üçün həcmi və həcm elastiklik modulunun qiymətlərini təyin edir. Burada  $V_0$  tarazlıq halda həcm,  $E_{tot}(V_0)$  – tarazlıq enerjisidir. Birç – Murnaqan tənliyinə daxil olan B–həcmi elastiklik modulu və  $B_P$ -həcmi elastiklik modulunun təzyiqlə görə törəməsi hesablanmış nöqtələrə uyğunlaşdırmaqla tapılır. Qeyd etməliyik ki,  $\beta$  – InTe üçün həcmnin dəyişməsi, hidrostatik təzyiqlə deyil laylar müstəvisində təsir edən gərginlik vasitəsilə hesablanmış. Entalpiyanı

$$H = E_{tot} + P V \quad (2)$$

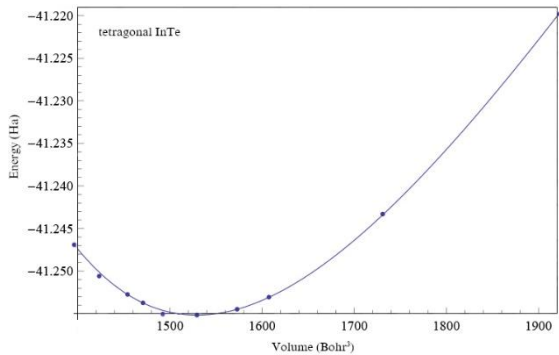
hesablayanda bunu nəzərə almaq lazım gəlir və ümumiyyətlə təzyiqlə

$$P = - \frac{\partial E_{tot}}{\partial V} \quad (3)$$

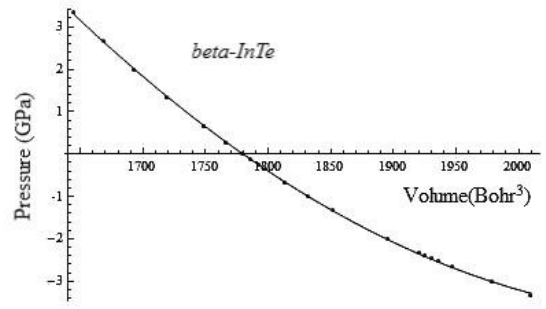
əks işarə ilə tam enerjinin həcmə görə törəməsidir. Şəkil 3 və 4 – də təzyiqlin elementar özəyin həcmindən asılılığı, uyğun olaraq, heksaqonal və tetraqonal InTe üçün göstərilmişdir. Nəhayət, 5-ci şəkilə hər iki kristallik faza üçün hesablanmış entalpiya birlikdə müqayisə üçün verilmişdir. Şəkildən görünür ki,  $\beta$  –InTe kristalın entalpiyası tetraqonal InTe nisbətən kiçikdir. Deməli, sıfır temperaturunda və (- 4, 4) GPa təzyiql arasında  $\beta$  –InTe daha dayanıqlıdır.



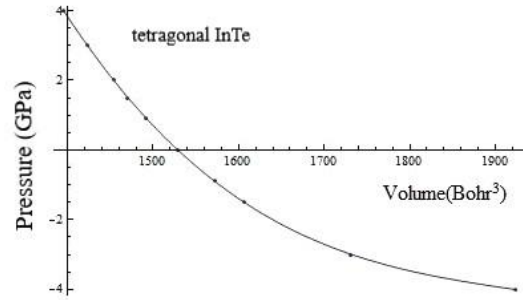
Şəkil 1.  $\beta$ -InTe üçün tam enerjinin elementar özəyin həcmindən asılılığı.



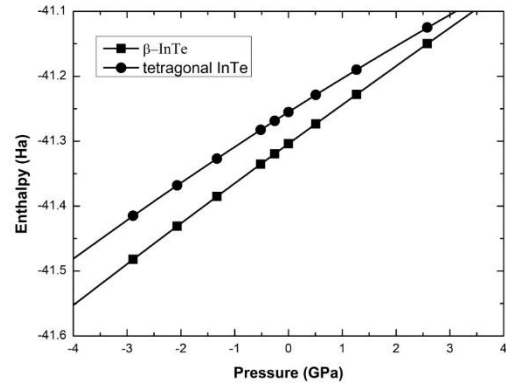
Şəkil 2. Tetraqonal InTe üçün tam enerjinin elementar özəyin həcmindən asılılığı.



Şəkil 3.  $\beta$ -InTe üçün təzyiqlin elementar özəyin həcmindən asılılığı



Şəkil 4. Tetraqonal InTe təzyiqlin elementar özəyin həcmindən asılılığı



Şəkil 5.  $\beta$ -InTe və tetraqonal InTe üçün entalpiyaların təzyiqlə asılılığı.

## XÜLASƏ

Göstərilmişdir ki, sıfır temperatur və (- 4, 4) GPa təzyiql arasında InTe heksaqonal fazada tetraqonal fazaya nisbətən daha dayanıqlıdır.

## TƏŞƏKKÜR

Müəlliflər nəzəri hesablamalara texniki dəstək göstərdikləri üçün AZGRID layihəsinin heyətinə və xüsusi olaraq Aleksey Bondyakova (Nüvə Araşdırma İnstitutu, Dubna, Rusiya) təşəkkür edir.

- 
- [1] *O.Z. Alekperov, M.O. Godjaev, M.Z. Zarbaliev, R. Suleimanov, Solid State Commun. 77, 65 (1991)*
- [2] *M. Zapata-Torres, J.L. Pena, Y. P. Mascarenhas, R. Castro-Rodriguez, M. Melendez-Lira, O. Calzadilla, Superficies y Vacio 13, 69-71 (2001).*
- [3] *V. Zolyomi, N. D. Drummond, and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B 89, 205416 (2014).*
- [4] *S. Geller, Jayaraman and G. W., Hull Jr., J Phys. Chem.Solids 26, 353 (1965)*
- [5] *K. Schubert, E. Dore and M. Klugue Z Metallkd. 46, 216 (1955)*
- [6] *J. A. A.Ketelaar, W. H. t'Hart, M. Moerel and D. Polder, Z. kristallogr. 101, 367 (1939)*
- [7] *X. Gonze, B. Amadon, P.M. Anglade, J.M. Beuken, F. Bottin, P. Boulanger, F. Bruneval, D. Caliste, R. Caracas, M. Cote, T. Deutsch, L. Genovese, Ph. Ghosez, M. Giantomassi, S. Goedecker, D.R. Hamann, P. Hermet, F. Jollet, G. Jomard, S. Leroux, M. Mancini, S. Mazevet, M.J.T. Oliveira, G. Onida, Y. Pouillon, T. Rangel, G.M. Rignanese, D. Sangalli, R. Shaltaf, M. Torrent, M.J. Verstraete, G. Zerah, J.W. Zwanziger, Comp. Phys. Comm. 180, 2582 (2009)*
- [8] *C. Hartwigsen, S. Goedecker, J. Hutter. Phys. Rev. B 58, 3641 (1998)*
- [9] *H. Monkhorst, J. Pack, Phys. Rev. B 13, 5188 (1976)*