

Əlyazması hüququnda

PÜRÜZƏ FAZİL QIZI ƏLİYEVA

***InGaSe₂* BİRLƏŞMƏSİNİN ELEKTROFİZİKİ,
FOTOELEKTRİK XASSƏLƏRİ, ZONA QURULUŞU VƏ OPTİK
SABİTLƏRİ**

2220. 01 – Yarımkəçiricilər 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 I – 2016

İş Azərbaycan Texniki Universitetində yerinə yetirilmişdir.

Elmi rəhbərlər: fizika-riyaziyyat elmləri doktoru,
professor **E.M.QOCAYEV**
fizika elmləri doktoru,
professor **Z.A.CAHANGIRLI**

Rəsmi opponentlər:
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor **H.S.ORUCOV**
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor **N.M.MEHDIYEV**

Aparıcı təşkilat: AMEA-nın Radiasiya Problemləri İnstitutu
“Seqnetoelektriklərin radiasiya fizikası” laboratoriyası

Dissertasiyanın müdafiəsi «_07_» ___12___2016-cı il saat ___
Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutunun nəzdində
fəaliyyət göstərən D 01.011 Dissertasiya Şurasında keçiriləcək.

Ünvan: Bakı, Az-1143, H.Cavid pr., 131

Faks: (+99412) 4 47 04 56;

E-mail: director@physics.ab.az

Dissertasiya ilə Azərbaycan MEA Fizika İnstitutunun kitabxanasında tanış
olmaq olar.

Avtoreferat «___» _____ 2016-cı ildə göndərilmişdir.

**Dissertasiya Şurasının elmi katibi,
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor**

D.H.Arashlı

İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

Mövzunun aktuallığı: Son zamanlar güclü anizotropik elektron və fonon spektrinə malik aşağıölçülü zəncirvari kristallara elmi maraq artmışdır. Aşağıölçülü binar və üçqat *TlSe* tipli kristalların zona quruluşları, optik və dinamik xassələri intensiv surətdə öyrənilməkdədir. Bu birləşmələrin tədqiq olunması fiziki xassələrin tərkibdən, strukturdan və kimyəvi əlaqələrin xarakterindən asılılığının qanunauyğunluqlarını aşkar etmək üçün mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Belə qanunauyğunluqların müəyyən edilməsi verilmiş fiziki xassələrə malik yarımkeçirici maddələrin məqsədyönlü axtarışına imkan verir. *TlSe* tipli kristallar həm zəncirvari yarımkeçiricilərin kristallik quruluşundan doğan məxsusiyyətlərinin araşdırılması, həm də texniki tətbiq nöqtəyi nəzərdən maraqlı tədqiqat obyektləridir.

Maddələrin paralel olaraq eksperimental və nəzəri öyrənilməsi həm elmi, həm də praktiki cəhətdən əhəmiyyət kəsb edir, çünki bu tədqiqatlar yarımkeçiricilərdə baş verən fiziki prosesləri dərinlən araşdırmağa imkan verir. Optik tədqiqat metodları 20eV-a qədər enerji intervalında yarımkeçiricilərin enerji spektri haqqında informasiya almaq üçün əsas vasitə hesab olunur. Fotoelektrik ölçmələri isə qadağan zolağı ətrafında zonaların strukturu haqqında dəqiq informasiya verir və optik tədqiqatları tamamlayır.

TlSe tip $A^m B^m C^m$ kristallar güclü anizotropik kristallik quruluşa malik zəncirvari kristallar arasında xüsusi yer tutur. *TlSe* və onun tipindən olan binar (*TlS*, *InTe*) və üçqat (*TlInSe₂*, *TlGaTe₂*, *TlInTe₂*) yarımkeçirici birləşmələr bir sıra maraqlı xassələrinə görə uzun illərdir mühüm tədqiqat obyektləridir. Bu maddələrin istilik-fiziki, termodinamik, quruluş xassələrinə dair çoxlu sayda eksperimentlər aparılmış, müxtəlif metodlarla nəzəri tədqiqatlar yerinə yetirilmiş və mühüm nəticələr əldə edilmişdir. *TlSe* tip yarımkeçirici maddələr fəza simmetriya qrupu D_{4h}^{18} (I4/mcm) olan həcməmərkəzləşmiş qəfəsdə tetraqonal sinqoniyada kristallaşır. Zəncirvari *TlSe* və onun üçqat analoqlarının elektrik, fotoelektrik, optik və digər xassələrində onların praktiki tətbiqinə geniş imkanlar yaradan bir sıra maraqlı xüsusiyyətlər aşkar edilmişdir. Bu maddələrdə pyezofotorezistiv effekt müşahidə olunmuşdur, onlar tenzodatçiklər kimi istifadə olunur və spektrin yaxın infraqırmızı oblastında fətohəssas olduqlarından infraqırmızı detektorlar üçün perspektivli materiallar hesab olunur. Digər tərəfdən, yarımkeçirici halkogenidlərdə çevirmə effekti kəşf edildikdən sonra onların əsasında çevik cihazların və qurğuların yaradılması istiqamətində aparılan

tədqiqat işləri böyük vüsət almışdır. Həmin işlər bu effektin meydana gəlmə mexanizmlərinin araşdırılması və yeni analoji xassəli maddələrin axtarışı istiqamətində aparılır. Çünki iş prinsipi və çevirmə effekti mənfi diferensial müqavimətli cihazlarla əlaqədar olan yarımkeçirici cihazlardan istifadə olunması, mürəkkəb sxemlərin sadə yolla həllinə kömək edir. Belə qurğularda əks rabitə kənar dövrələrin köməyi ilə deyil, onlarda mövcud olan daxili müsbət əks rabitənin köməyi ilə yaradılır. Ona görə də mənfi diferensial müqavimətli cihazların praktikada tətbiq edilməsi onlardan istifadə edilməklə yaradılan qurğuların etibarlılığını artırır, ölçülərinin, çəkirlərinin azalmasına, habelə istifadə olunan enerjiyə qənaət edilməsinə imkan verir.

Tədqiqat obyektini kimi $TlSe$ tipli $InGaSe_2$ yarımkeçirici birləşməsi seçilmişdir. Bu birləşmədə birvalentli In atomu 8 Se atomu ilə, üçvalentli Ga atomu isə 4 Se atomu ilə əhatə olunmuşdur. Üçvalentli Ga atomu Se atomu ilə birlikdə kristalın tetraqonal oxu boyunca yönələn zəncirlər əmələ gətirir.

Bu kristalların xarakterik xüsusiyyəti ondan ibarətdir ki, müəyyən qaydada düzülmüş atomlardan ibarət mənfi yüklü zəncirlər c kristallik oxu boyunca yönəlir. Zəncirlərdəki atomlar arasında güclü ion-kovalent əlaqəsi, zəncirləri arasında isə zəif Van-der-Vaals əlaqəsi mövcuddur. Zəncirlər arasıləqə zəif olduğundan kristal c oxu boyunca asanlıqla parçalanır.

$A^{III}B^{III}X_2^{VI}$ tip zəncirvari və laylı kristallik quruluşa malik birləşmələrin elektrofiziki, istilik, optik və fotoelektrik xassələrinin tədqiqilə onların yüksək fətohəssaslığa, tenzohəssaslığa, yaddaşlı çevirici xassəyə malik olmaları barədə elmi ədəbiyyatda kifayət qədər məlumatlar verilmişdir. Amma $InGaSe_2$ birləşməsinin mövcud olması barədə ilkin məlumatların uzun müddət əvvəl məlum olmasına baxmayaraq, onun sistemli tədqiqi tədqiqatçıların diqqət mərkəzindən kənar qalmışdır. Elmi ədəbiyyatda yalnız həmin birləşmənin bir sıra xassələrinin öyrənilməsi barədə epizodik məlumatlar verilmişdir. Qeyd olunanlar baxımından $InGaSe_2$ birləşməsinin kompleks şəkildə tədqiqinə və praktiki imkanlarının araşdırılmasına ehtiyac duyulur.

Dissertasiya işinin məqsədi: $InGaSe_2$ birləşməsinin rentgenofaza analizi, elektrofiziki və fotoelektrik xassələrinin eksperimental tədqiqi. Təməl prinsiplərdən hesablamalar əsasında elektron və optik xassələrinin izahı, anizotrop zəncirvari quruluşun bu xassələrə təsiri və birləşməyə daxil olan ayrı-ayrı atomların kimyəvi rabitəyə verdiyi əlavənin təyin olunması.

Göstərilən məqsədə çatmaq üçün aşağıdakı məsələlər qoyulmuşdur:

- Müvafiq texnoloji rejim seçməklə $InGaSe_2$ birləşməsinin sintezi və monokristallarının yetişdirilməsi;
- $InGaSe_2$ birləşməsinin faza analizinin aparılması;
- $InGaSe_2$ kristalında atomların termodinamik tarazlıq halı üçün qəfəs parametrlərinin və atom koordinatlarının hesablanması;
- Zəncirvari $InGaSe_2$ kristalında yükdaşıyıcıların enerji spektrlərinin və optik funksiyalarının spektral və polyarlaşma asılılıqlarının təyin olunması, onların aşağıölçülükdən doğan məxsusiyyətlərinin araşdırılması, elektron və dəşiklərin tərs effektiv kütlə tenzorlarının hesablanması;
- $InGaSe_2$ birləşməsində tam zona hal sıxlığı və ayrı-ayrı atomlara proyeksiyalanmış parsial zona hal sıxlıqlarının təməl prinsiplərdən hesablanması, kimyəvi rabitənin təbiətinin və birləşməni təşkil edən atomların rabitədəki rolunun təyin olunması;
- Hesablanmış fonon hal sıxlığı əsasında termodinamik funksiyaların və parametrlərin hesablanması;
- $InGaSe_2$ birləşməsinin elektrofiziki xassələrinin kənar amillərin təsirindən asılı olaraq tədqiq edilməsi, yarımkeçirici parametrlərinin hesablanması;
- $InGaSe_2$ birləşməsinin volt-ampere xarakteristikasının temperaturdan asılı olaraq tədqiqi;
- $InGaSe_2$ birləşməsinin fotoelektrik xassələrinin tədqiq edilməsi.

Elmi yenilik. Dissertasiya işinin elmi yeniliyi aşağıdakılardır:

1. Sıxlıq Funksionalı Nəzəriyyəsi tətbiq olunmaqla Brilluen zonasının simmetrik nöqtələri və xətləri üzrə $InGaSe_2$ birləşməsinin elektron spektri hesablanmış, valent və keçirici zonanın ekstremumları identifikasiya olunmuş və göstərilmişdir ki, verilmiş maddə düzkeçidli yarımkeçiricidir.
2. $InGaSe_2$ birləşməsinin təməl prinsiplərdən hesablanmış tam və ayrı-ayrı atomlara proyeksiya olunmuş parsial elektron hal sıxlıqları analiz olunaraq enerji hallarının atom mənşəyi müəyyən edilmişdir.
3. $InGaSe_2$ kristalında yükdaşıyıcıların effektiv kütlələri hesablanmış, onların güclü anizotrop olduğu aşkara çıxarılmış və bu özəlliyin birləşmənin zəncirvari quruluşu ilə əlaqəsi müəyyən edilmişdir.
4. $InGaSe_2$ kristalının dielektrik funksiyalarının həqiqi və xəyalı hissəsinin, digər optik sabitlərinin spektral və polyarlaşma asılılıqları hesablanmışdır.
5. $InGaSe_2$ kristalının molyar istilik tutumunun temperaturdan asılılığı hesablanmış və müəyyən edilmişdir ki, 5 K-dən aşağı

temperaturlarda bu birləşmə üçün sabit həcmdə molyar istilik tutumunun qiymətləri Debayın T^3 kubik qanunu ilə dəyişir.

6. Müəyyən edilmişdir ki, $InGaSe_2$ birləşməsi yaddaşlı çevirici xassəyə malikdir və çevirmənin baş verdiyi astana gərginliyini lazımı istiqamətə idarə etmək mümkündür.
7. $InGaSe_2$ birləşməsində fluoressensiya və akustofotovoltaiq effektlər aşkar edilərək tədqiq edilmişdir.

Müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar:

1. Sıxlıq Funksionalı və Xəttiləşdirilmiş Birləşmiş Müstəvi Dalğalar (LAPW) metodundan istifadə etməklə $InGaSe_2$ zəncirvari kristalı üçün hesablanmış elektron zona quruluşu. Enerji zonalarının müəyyən edilmiş atom mənşəyi. $InGaSe_2$ birləşməsinin düzzolaqlı yarımkəçirici olması. Yükdaşıyıcılar üçün tərs effektiv kütlə tenzorunun hesablamaları və onlarda müəyyən edilmiş güclü anizotropluğu;
2. $InGaSe_2$ birləşməsində tam və ayrı-ayrı atomlara proyeksiyalanmış parsial hal sıxlıqları hesablamalarından müəyyən edilmiş atomlararası kimyəvi rabitə və atomların kimyəvi rabitədəki rolu;
3. $InGaSe_2$ birləşməsində müxtəlif polyarlaşmada zona quruluşu hesablamalarından müəyyən edilmiş dielektrik funksiyaları və onların əsasında hesablanmış optik spektrlər;
4. $InGaSe_2$ kristalının qəfəs parametrləri və atom koordinantları, Murnaghan və Birch-Murnaghan hal tənliklərinin parametrləri;
5. $InGaSe_2$ birləşməsinin elektrofiziki xassələrinin və parametrlərinin dəyişmə qanunauyğunluqları;
6. $InGaSe_2$ birləşməsində yaddaşlı çevirmə effekti, çevirmənin astana parametrlərinin kənar amillərdən asılılıqları;
7. $InGaSe_2$ birləşməsində fluoressensiya effekti;
8. $InGaSe_2$ birləşməsinə elektromaqnit və səs dalğalarının təsiri.

İşin praktiki əhəmiyyəti. Dissertasiya işində $InGaSe_2$ birləşməsinin volt-ampere xarakteristikasının tədqiqinin nəticələri müasir elektron qurğularında istifadə olunan yaddaş elementlərinin hazırlanmasında istifadə olunmaq üçün tövsiyə edilir. $InGaSe_2$ birləşməsində aşkar edilmiş akustofotovoltaiq effektin spektral xarakteristikasının səs və işıq dalğalarının təsiri ilə idarə olunmasına əsaslanaraq tədqiqat obyektindən gecəgörmə cihazlarında və digər qurğuların hazırlanmasında istifadə edilə bilər.

Çap olunmuş işlər. Dissertasiya işinin mövzusu üzrə 13 məqalə çap olunmuşdur.

İşin sınağı. Dissertasiya işinin əsas nəticələri aşağıdakı konfranslarda müzakirə olunmuşdur:

- “Nanotexnologiyalar və onların texnikada tətbiqi” mövzusunda I Beynəlxalq konfrans (Bakı, AzTU, 15-16 dekabr 2010)

- “Yüksək texnologiyalar və ali təhsil” Beynəlxalq elmi-texniki konfrans (Bakı, AzTU, 15-16 dekabr 2011);

-“Fizikanın müasir problemləri VI Respublika konfransı (Bakı, BDU, Fizika Problemləri İnstitutu, 14-15 dekabr 2012)

- «Микроэлектронные преобразователи и приборы на их основе» VII Международная научно-техническая конференция (Bakı-Sumqayıt, 28 noyabr 2013)

- “Fizikanın aktual problemləri” Beynəlxalq elmi konfransı (Bakı, BDU, 6 dekabr 2013)

- Doktorantların və gənc tədqiqatçıların XIX Respublika elmi konfransı (Bakı, ADİU, 7 aprel 2015)

- Gənc tədqiqatçıların III Beynəlxalq elmi konfransı (Bakı, Qafqaz Universiteti, 17-18 Aprel 2015)

- Opto-, nanoelektronika, kondensə olunmuş mühit və yüksək enerjilər fizikası” IX Respublika konfransı (Bakı, BDU, Fizika Problemləri İnstitutu, 25-26 dekabr 2015)

Dissertasiya işinin quruluşu və həcmi: Dissertasiya işinin ümumi həcmi 170 səhifə, o cümlədən mətn 96 səhifə, 39 şəkil, 8 cədvəl, 238 adda ədəbiyyat siyahısı olan 26 səhifə itəşkil edir. Dissertasiya işi girişdən, dörd fəsildən, əsas nəticələrdən, istifadə edilən ədəbiyyat siyahısından ibarətdir.

İşin qısa məzmunu: Girişdə mövzunun aktuallığı əsaslandırılmış, işin əsas məqsədi və həll ediləcək əsas məsələlər ifadə olunmuş, dissertasiyanın praktiki əhəmiyyəti göstərilmiş, dissertasiyanın elmi yeniliklərini təyin edən əsas nəticələr gətirilmiş və dissertasiya işinin qısa məzmunu şərh edilmişdir.

Dissertasiya işinin I fəslində laylı və zəncirvari kristallik quruluşlu $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ tip birləşmələrin kristallik və zona quruluşlarının tədqiqinə, xassələrinin öyrənilməsinə həsr edilmiş ədəbiyyat məlumatları təhlil edilmiş, dissertasiya işinin mövzusunun aktuallığı əsaslandırılmışdır.

Dissertasiya işinin II fəslində texnologiya məsələlərinin həllinə həsr edilmişdir. Dissertasiya işinin əvvəlində birləşməni əmələ gətirən elementlərin elektron quruluşları və xassələri barədə yığcam məlumat verilir. Burada $InGaSe_2$ birləşməsinin sintezi və mükəmməl monokristalının alınması texnologiyası şərh edilmiş, birləşmənin rentgenofaza analizi

aparılmışdır. Nəticədə, $InGaSe_2$ birləşməsinin tetraqonal sinqoniyada kristallaşib, $a=8.031\text{\AA}$, $c=6.09554\text{\AA}$ qəfəs sabitlərinə və D_{4h}^{18} fəza simmetriyasına malik olması aşkar edilmişdir. $InGaSe_2$ monokristalının mikrorelyefinin atom qüvvə mikroskopu vasitəsi ilə tədqiqinin nəticələri də bu fəsildə vermişdir. Bu fəsildə həmçinin xüsusi elektrik keçiriciliyinin, Holl və termo-e.h.q. əmsallarının temperatur asılılıqlarının tədqiqat üsulu, təcrübələrdə yol verilən xətalər barədə məlumatlar verilir. $InGaSe_2$ birləşməsinin volt-ampere xarakteristikasını tədqiq etmək üçün istifadə olunan qurğu barədə məlumatlar da burada verilib. Fəslin sonrakı bölümündə $InGaSe_2$ birləşməsində fluoressensiya və AFV effektləri tədqiq etməyə imkan verən qurğular barədə məlumatlar verilmişdir.

Dissertasiya işinin III fəslində Sıxlıq Funksionalından istifadə etməklə Pseudopotensial və Xəttiləşdirilmiş Birləşmiş Müstəvi Dalğalar metodu vasitəsilə çoxelektronlu məsələnin həllinin ümumi prinsipləri şərh olunmuşdur.

$InGaSe_2$ kristalı üçün qəfəs və atom quruluş parametrlərinin təməl prinsiplərdən hesablanması bu fəsildə verilmişdir. $InGaSe_2$ birləşməsinin elementar özəyində In , Ga və Se atomlarının koordinatları Cədvəl 1-də verilmişdir.

Kristalın qəfəs parametrləri və tetraqonal qəfəsdə tarazlaşmış atom koordinatları onlara təsir edən Hellman-Feynman qüvvələrinin minimallaşdırılması yolu ilə təyin olunmuşdur. Minimallaşdırılma prosesi qüvvə modullarının qiyməti 10^{-8} Ry/Bohr –dən kiçik qiymətlərə qədər davam etdirilmişdir. $InGaSe_2$ birləşməsinin qəfəs parametrlərinin optimallaşdırılmış qiymətləri rentgenostruktur analiz üsulu ilə təyin edilmiş qiymətləri bir-birləri ilə yaxşı uzlaşır (Cədvəl 2).

$InGaSe_2$ kristalı üçün təməl prinsiplərdən nəzəri hesablanmış qəfəs və halkogen parametrlərinin qiymətləri əsasında təyin olunmuş ionlararası rabitə uzunluqları Cədvəl 3-də verilmişdir. Göründüyü kimi, $InGaSe_2$ üçün təməl prinsiplərdən təyin edilmiş atomlar arası rabitə uzunluqları eksperimentdən hesablanmış rabitə uzunluqları ilə yaxşı uzlaşır.

Məlum Murnaqaq hal tənliyi qəfəsin tam enerjisinin qəfəsin həcmindən asılılığını ifadə edir. Murnaqaq hal tənliyinə daxil olan parametrlər elə seçilmişdir ki, tam enerjinin elementar qəfəsin həcmindən asılılıq qrafiki hesablama nöqtələrindən keçmiş olsun. Bu nəticələr Birç-Murnaqaq tənliyinə görə aparılmış hesablamalarla yaxşı uzlaşır (Cədvəl 4).

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0 B_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^3 B'_0 + \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \right\} \frac{1}{147036}$$

Cədvəl 1.

$InGaSe_2$ tetraqonal özəyində In , Ga və Se atomlarının koordinatları (qəfəs sabitlərinin hissələrində).

| Atom | Kristallik vəziyyət | Atomların koordinatları (a,a,c)-nin hissələrində |
|------|---------------------|---|
| In | 4(a) | (0,0,1/4) |
| | | (0,0,3/4) |
| | | (1/2,1/2,3/4) |
| | | (1/2,1/2,1/4) |
| Ga | 4(b) | (0,1/2,1/4) |
| | | (0,1/2,3/4) |
| | | (1/2,0,3/4) |
| | | (1/2,0,1/4) |
| Se | 8(h) | ($x,1/2+x,0$) |
| | | ($-x,1/2-x,0$) |
| | | ($1/2+x,-x,0$) |
| | | ($1/2-x,x,0$) |
| | | ($1/2+x,x,1/2$) |
| | | ($1/2-x,-x,1/2$) |
| | | ($x,1/2-x,1/2$) |
| | | ($-x,1/2+x,1/2$) |

Cədvəl 2.

$InGaSe_2$ üçün hesablanmış qəfəs və halkogen parametrləri.

| Parametr | Psp: HGH, 444, 40 Ha | | LAPW | | Eksp. |
|---------------|----------------------|-------|--------|-------|---------------|
| $a, \text{Å}$ | 8.0254 | 0.3 % | 8.0138 | 0.5 % | 8.0511±0.01 |
| $c, \text{Å}$ | 6.9331 | 9.7 % | 6.9534 | 10 % | 6.3174±0.02 |
| x | 0.1725 | 5.4 % | 0.1720 | 5.1% | 0.1636±0.0009 |

Alınmış bu nəticələr $InGaSe_2$ birləşməsində fonon spektrinin hesablanması və deformasiyanın bu birləşmənin elektron və optik xassələrinə təsirinin öyrənilməsində istifadə oluna bilər.

Cədvəl 3.

$InGaSe_2$ kristalını təşkil edən atomlar arasındakı hesablanmış rabitə uzunluqları (Monhorst-Pak qridi: $4 \times 4 \times 4$, maksimal kinetik enerji: 40 Ha)

| Məsafələr | Psp: HGH | Eksp. |
|---|----------|---------|
| $d(Ga^{3+}-Se^{2-})$ | 2.571 Å | 2.521 Å |
| $d(In^{1+}-Se^{2-})$ | 3.523 Å | 3.511 Å |
| $d(Ga^{3+}-Ga^{3+}) = d(In^{1+}-In^{1+})$ | 3.275 Å | 3.261 Å |
| $d(Se^{2-}-Se^{2-})$ | 3.856 Å | 3.842 Å |
| $d(Ga^{3+}-In^{1+})$ | 4.129 Å | 4.155 Å |
| $d(Se^{2-}-Se^{2-})$ | 4.239 Å | 4.246 Å |

Cədvəl 4.

Birç-Murnağan və Murnağan hal tənləklərinin parametrləri

| Parametr | $InGaSe_2$ | |
|--------------|---------------|-----------------|
| | Murnaghan | Birch-Murnaghan |
| V_0 (a.e.) | 1419.6586 | 1419.4968 |
| E_0 (Rid.) | -50751.799593 | -50751.799593 |
| B_0 (QPa) | 47.1850 | 47.2470 |
| B_0^* | 4.6189 | 4.7923 |

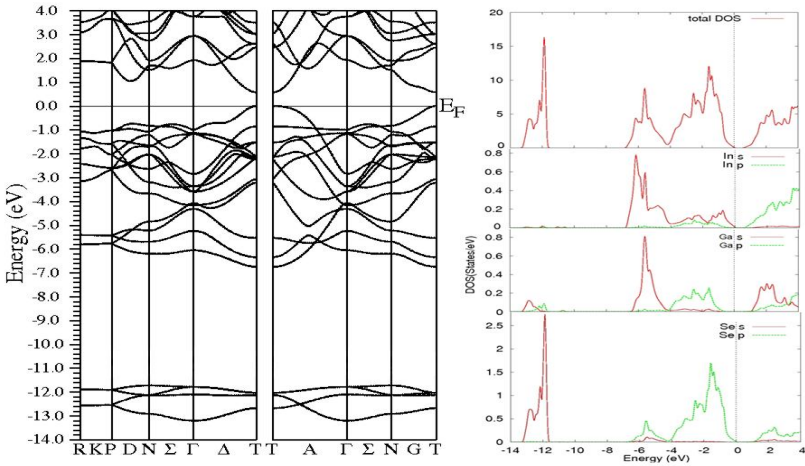
Sıxlıq Funksionalı Nəzəriyyəsi yaxınlaşmasında LAPW metodundan istifadə edərək WIEN2k proqramlar paketi vasitəsilə $InGaSe_2$ kristalının Brilluen zonasının simmetrik nöqtələri və xətləri üzrə elektron spektri, tam və ayrı-ayrı atomlara proyeksiyalanmış parsial zona halları sıxlığı hesablanmışdır (Şəkil 1).

Hesablamadan alınan zona quruluşundan görünür ki, valent zonalarını üç qrupa ayırmaq olar. Ən yuxarı əsas qrup on zonadan ibarətdir və ~ 3.5 eV enə malikdir. Qrup nəzəriyyəsi analizi və ayrı-ayrı atomlar üçün təyin olunmuş parsial hal sıxlıqları göstərir ki, bu zonalar əsasən In, Ga və Se atomlarının p - hallarından törəyir. Bu qrupun ən yuxarı

zonaları valent zonasının tavanını təşkil edir və *In* ionlarının *5s*-hallarından törəyir.

Əsas qrupdan aşağıdakı qrup dörd zonadan ibarətdir və ~ 2.5 eV enə malikdir. Bu zonalar əsasən *In* və *Ga* atomlarının *s*- hallarından törəyir. -12.5 eV ətrafında yerləşən dörd zonadan ibarət ən aşağı qrup *Se* atomlarının *s*- hallarından törəyir. Bu qrupa daxil olan zonalar energetik olaraq keçirici zonanın dibindən çox aşağıda yerləşdiyindən onlar *InGaSe₂* birləşməsinin yarımkəçirici və optik xassələrində iştirak etmirlər.

Keçirici zonanın minimumu əsasən *In* və *Se* atomlarının *p*-, *Ga* atomunun isə *s*- hallarından törəyir. Keçirici zonanın minimumu və valentzonasının maksimumu yüksək simmetriyalı T nöqtəsində Brilluen zonasının sərhədində yerləşir və uyğun olaraq T₃ və T₄ gətirilməyən təsvirlərinə aiddir. Keçirici zonanın digər minimumu D xətti üzərində yerləşir və D₁ gətirilməyən təsviri vasitəsilə çevrilir.



Şəkil 1. *InGaSe₂* birləşməsinin DFT ilə hesablanmış zona quruluşu, tam və parsial zona halları sıxlığı. Enerji şkalasının sıfırı valent zonasının tavanında yerləşir

Dipol yaxınlaşmasında qadağan olunmuş T₃ - T₄ keçidi minimal düz keçidləri təyin edir və aktivləşmə enerjisi $E_g(T_3 \rightarrow T_4) = 0.85$ eV təşkil edir.

Məlumdur ki, effektiv kütlə kristallik yarımkəçirici maddələrin elektron xassələrinin vacib xarakteristikalarından biridir. Elektron və deşiklərin effektiv kütləsinin təyin olunması Van-Hov məxsusiyətlərinin araşdırılmasında, Holl effektində, kritik nöqtələrin analizində, maqnit

sahəsində Landau səviyyələrinin formalaşmasında mühüm əhəmiyyət kəsb edir. $InGaSe_2$ kristalında ekstremumlar ətrafında $E(k)$ asılılığını kvadratik qəbul etməklə ayrı-ayrı istiqamətlərdə effektiv kütlələr hesablanmışdır. Tərs effektiv kütlə tenzorunun komponentləri aşağıdakı düsturla təyin edilir:

$$\left[\frac{m_0}{m^*} \right]_{ij} = \delta_{ij} + \frac{2}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n, k_0 | \hat{P}_i | n', k_0 \rangle \langle n', k_0 | \hat{P}_j | n, k_0 \rangle}{E_n(k_0) - E_{n'}(k_0)}$$

burada m_0 –elektronun sükunət kütləsi; δ_{ij} –Kroniker simvolu, k_0 nöqtəsində $\langle n, k_0 | \hat{P}_i | n', k_0 \rangle - \hat{P}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$ impuls operatorunun matrisa elementi, n, n' - elektron zonalarıdır. $|n, k_0\rangle$ - elektronun dalğa funksiyasıdır.

$$\langle n, k_0 | \hat{P}_i | n', k_0 \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \Psi_{n k_0}^*(r) \hat{P}_i \Psi_{n' k_0}(r) d^3 r$$

Ω - elementar qəfəsin həcmidir.

Valent zonasının maksimumu $k_0=0.5b_1-0.5b_2+0.5b_3$ olan T nöqtəsində (b_1, b_2, b_3 -tərs qəfəsin bazis vektorlarıdır) yerləşir. Hesablamalardan deşiyin tərs effektiv kütlə tenzoru:

Bu ifadədən alınır ki, deşiklərin effektiv kütləsi istiqamətdən asılı olaraq güclü anizotropluğa malikdir və deşiyin tetraqonal oxa paralel istiqamətdə effektiv kütləsi $m_{h,\parallel}^*$, ona perpendikulyar

$$\frac{m_0}{m^*} = \begin{vmatrix} -2.23 & 0 & 0 \\ 0 & -2.23 & 0 \\ 0 & 0 & -0.32 \end{vmatrix}$$

istiqamətdəki effektiv kütləsi $m_{h,\perp}^*$ -dan təqribən 7 dəfə böyükdür.

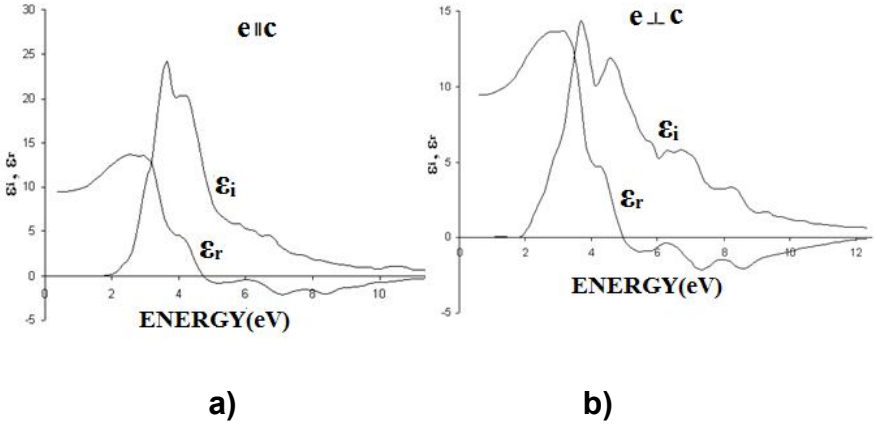
Minimal düz keçidə uyğun minimum keçirici zonada A xətti üzərində olub T nöqtəsinin yaxın ətrafında yerləşir. Bu nöqtədə elektronlar üçün tərs effektiv kütlə tenzoru:

$$\frac{m_0}{m_e^*} = \begin{vmatrix} 2.32 & 0 & 0 \\ 0 & 2.32 & 0 \\ 0 & 0 & 1.93 \end{vmatrix}$$

$InGaSe_2$ birləşməsinin simmetriyasına görə ekstremumlar ətrafındakı izoenegetik səthlər fırlanma ellipsoidləri təşkil edir və bu səbəbdən həm elektronların, həm də deşiklərin tərs effektiv kütlə tenzorları diaqonal şəkllə malikdir. Əslində bu belə də olmalıdır, çünki kristalın simmetriyasından alınır ki, ekstremumlar ətrafında izoenegetik səthlər fırlanma ellipsoidləridir.

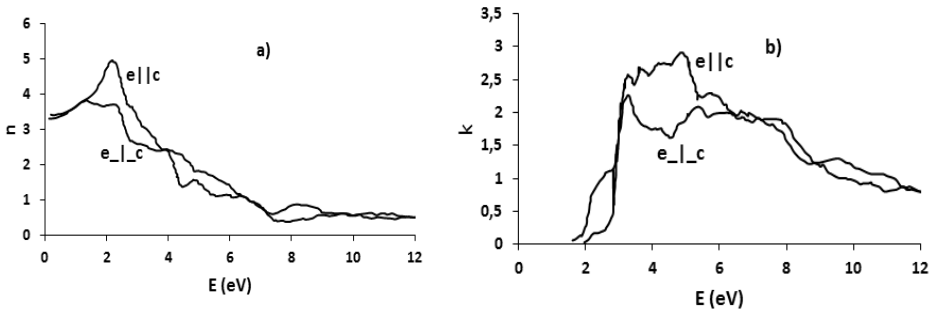
Bu fəsildə həmçinin elektron spektri əsasında $InGaSe_2$ birləşməsinin optik sabitləri təməl prinsiplərdən hesablanmışdır (Şəkil 2). Elektromaqnit şüalanmasının $e\parallel c$ və $e\perp c$ polyarlaşmalarında, 0÷12 eV

enerji intervalında $InGaSe_2$ birləşməsinin dielektrik funksiyasının xəyali ϵ_i və həqiqi ϵ_r hissələri, sındırma n və udma k əmsallarının (ekstinksiya), spektrləri hesablanmış və təhlil olunmuşdur. $InGaSe_2$ birləşməsi üçün hesablanmış optik funksiyaları xarakterizə edən əsas ümumi xüsusiyyət onların polyarlaşmadan güclü asılılığının müşahidə olunmasıdır. Təməl prinsiplərdən hesablanmış zona quruluşu və nəzəri qrup analizindən alınan seçmə qaydaları əsasında spektrlərin polyarlaşma asılılıqlarını nəzərə alaraq belə nəticəyə gəlmək olar ki, $1\div 4$ eV intervalında $\epsilon_i(E)$ -nin strukturları anion və kationların yuxarı valent p - zonalardan, 7 eV ətrafındakı strukturlar isə kationların valent s - zonalardan aşağı keçirici zonalara optik keçidlərlə müəyyən olunur (Şəkil 3).



Şəkil 2. $InGaSe_2$ birləşməsinin $e||c$ (a) və $e\perp c$ (b) polyarlaşmaları halında dielektrik nüfuzluluqlarının xəyali $\epsilon_i(E)$ və həqiqi $\epsilon_r(E)$ hissələrinin enerjidən asılılıqları

$InGaSe_2$ kristalı üçün sərbəst enerji, entropiya və sabit həcmdə istilik tutumunun temperaturdan asılılığı təməl prinsiplərdən hesablanmış və təhlil olunmuşdur. $0\div 400$ K temperatur intervalında kvazi-harmonik yaxınlaşmada molyar istilik tutumunun temperaturdan asılılığı hesablanmış və qrafiki qurulmuşdur. Hesablamalar göstərir ki, 5 K-dən aşağı temperaturlarda $InGaSe_2$ birləşməsi üçün sabit həcmdə molyar istilik tutumunun qiymətləri Debayın T^3 kubik qanunu ilə dəyişir.



Şəkil 3. *InGaSe₂* birləşməsinin $e||c$ və $e\perp c$ polyarlaşmaları halında sındırma əmsalının həqiqi $n(E)$ (a) və xəyali $k(E)$ (b) hissələrinin enerjidən asılılıqları.

Dissertasiyaşının IV fəslində *InGaSe₂* birləşməsinin elektrofiziki və fotoelektrik xassələrinin tədqiqinin nəticələri barədə məlumatlar toplanmışdır. Fəslin əvvəlində *InGaSe₂* birləşməsinin xüsusi elektrik keçiriciliyinin, Holl və termo-e.h.q. əmsallarının geniş temperatur intervalında temperatur asılılıqlarının tədqiqinin nəticələri verilmişdir. Burada xüsusi elektrik keçiriciliyinin, Holl və termo-e.h.q. əmsallarının 300÷800K intervalında temperatur asılılıqlarının tədqiqinin nəticələri verilmiş, birləşmənin fundamental parametrlərinin: qadağan olunmuş zonanın eninin, sərbəst yükdaşıyıcıların yürüklüyünün və konsentrasiyasının, keçiriciliyin tipinin təyin edilməsi barədə məlumat verilir. Müəyyən edilmişdir ki, xüsusi elektrik keçiriciliyinin və Holl əmsalının yüksək temperaturlu mailliklərinə əsasən təyin edilmiş qadağan olunmuş zonanın eni 1.5 eV və 1.52 eV olub bir-birilə yaxşı uzlaşır. Yürüklüyün temperaturdan asılı olaraq $T^{-3/2}$ qanunu üzrə dəyişməsi, yəni yükdaşıyıcıların əsasən uzununa akustik fononlardan səpilməsi müəyyən edilmiş, elektrik keçiriciliyinin, Holl və termo-e.h.q. əmsallarının temperatur asılılıqlarının bir-birini təsdiq etməsi müəyyən edilmişdir.

InGaSe₂ birləşməsinin volt-ampər xarakteristikasının tədqiqinin nəticələri də bu fəsilə verilib. Tədqiqat müxtəlif temperaturlarda statik rejimdə aparılmış, kontakt olaraq mis və alimiumdan istifadə edilmişdir.

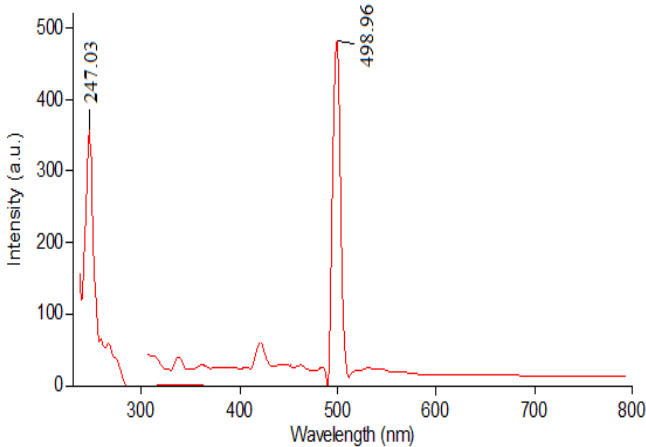
Müxtəlif temperaturlarda gərginliyin müxtəlif qiymətlərində *InGaSe₂* birləşməsinin volt-ampər xarakteristikasında mənfi diferensial müqavimət oblastı müşahidə edilir. *InGaSe₂* birləşməsinin volt-ampər xarakteristikasının mənfi diferensial müqavimət oblastının formalaşması yalnız daxili müsbət əks rəbitənin olduğu halda mümkündür. S-ə bənzər volt-ampər xarakteristikaya malik diodlarda cərəyana görə müsbət əks

rabitə formalaşır. Bu o deməkdir ki, cərəyanın istənilən dəyişməsi onun elə həmin istiqamətdə sonrakı dəyişməsinə səbəb olmalıdır.

Beləliklə, $InGaSe_2$ birləşməsində mənfi diferensial müqavimətin meydana çıxmasının zəruri şərti kimi baza oblastında injeksiya mexanizmi ilə əlaqədar keçiriciliyin əlavə artmasını hesab etmək olar. Fəslin sonrakı bölümündə $InGaSe_2$ monokristalında aşkar edilmiş fluoressensiya effektinin tədqiqinin nəticələri barədə məlumatlar verilmişdir.

$InGaSe_2$ birləşməsində fluoressensiya spektri tədqiq edilmiş və tədqiqatın nəticələri şəkil 4-də göstərilmişdir. Həyəcanlanma 247.3 nm dalğa uzunluğunda yarığın eninin 2.5nm olması halında aparılmışdır. Göründüyü kimi fluoressensiya spektrində dalğa uzunluğunun 322.00 nm; 415.97 nm və 498.95 nm qiymətlərində $InGaSe_2$ birləşməsinin lüminessensiya spektrində maksimumlar müşahidə edilir. $InGaSe_2$ birləşməsinin 300÷600 nm dalğa uzunluğu intervalında fluoressensiya spektrinin tədqiqi göstərir ki, bu materialdan çoxfunksiyalı elektron qurğularının hazırlanmasında müvəffəqiyyətlə istifadə oluna bilər.

Növbəti bölümə $InGaSe_2$ birləşməsində aşkar edilmiş AFV effektin tədqiqinin nəticələri şərh edilir. Aşkar edilmişdir ki, $InGaSe_2$ monokristalına eyni zamanda, bir-birinə perpendikulyar istiqamətdə səs və elektromaqnit dalğaları ilə təsir edildikdə nümunənin ucları arasında AFV e.h.q. və ya qısa qapanma cərəyanı meydana çıxır. Spektral xarakteristikanı səs və elektromaqnit dalğalarının tezliklərini dəyişməklə



Şəkil 4. $InGaSe_2$ birləşməsinin fluoressensiya spektri

arzu olunan istiqamətə idarə etmək mümkün olur ki, bu da bu effektin böyük praktiki əhəmiyyət kəsb etməsini göstərir.

İşığın və səs dalğalarının nümunəyə eyni zamanda təsiri zamanı elektrodlar arasında nəzərə çarpan e.h.q. və ya qısaqapanma cərəyanı meydana çıxır. Aşkar edilmişdir ki, meydana çıxan AFV e.h.q.-nin qiyməti işığın intensivliyindən və spektral tərkibindən, həmçinin səsin tezliyindən və amplitudundan asılı olur və onu nümunənin üzərinə işıq salmamaqla və ya akustik dalğanın təsirini götürməklə sifra qədər azaltmaq olur. $InGaSe_2$ birləşməsində aşkar edilmiş AFV effektə müəyyən yaxınlaşmada akustoelektrik effektin işığın təsiri ilə dəyişməsi kimi də baxmaq olar. AFV effektin özünün fiziki mahiyyəti yükdaşıyıcıların elastiki dalğalar tərəfindən sövq edilməsi ilə yarımqeçiricidə e.h.q.-nin yaranması ilə əlaqədardır. Spektral xarakteristikamı səs və elektromaqnit dalğalarının tezliklərini dəyişməklə arzu olunan istiqamətə idarə etmək mümkün olur ki, bu da AFV effektin böyük praktiki əhəmiyyət kəsb etməsini göstərir.

DISSERTASIYANIN ƏSAS NƏTİCƏLƏRİ

1. Müvafiq texnoloji rejim seçilməklə $InGaSe_2$ birləşməsinin mükəmməl monokristalı yetişdirilmiş, AQM vasitəsilə səthinin mikroyefi öyrənilmiş, rentgenofaza üsulu ilə qəfəs parametrləri təyin edilmişdir.
2. Müəyyən edilmişdir ki, $InGaSe_2$ kristalında valent zonası bir-birindən təcrid olunmuş üç qrupa bölünür. Valent zonasının ən yuxarisında yerləşən və ~ 3.5 eV enə malik qrup əsasən In , Ga və Se atomlarının p - hallarından törəyir. Valent zonasının tavanını təşkil edən zonalar əsasən In ionlarının $5s$ - hallarından törəyir. Əsas qrupdan aşağıdakı dörd zonadan ibarət qrup ~ 2.5 eV enə malikdir və əsasən In və Ga atomlarının s - hallarından törəyir. -12.5 eV ətrafında yerləşən dörd zonadan ibarət ən aşağı qrup Se atomlarının s - hallarından törəyir. Bu qrupa daxil olan zonalar energetik olaraq keçirici zonanın dibindən çox aşağıda yerləşir və $InGaSe_2$ birləşməsinin yarımqeçirici və optik xassələrində iştirak etmirlər. Müəyyən edilmişdir ki, $InGaSe_2$ kristalında elektronların və deşiklərin effektiv kütləsi güclü anizotropluğa malikdir.
3. Müəyyən edilmişdir ki, $InGaSe_2$ kristalında $e||c$ polyarlaşmasında optik udulmanın $e \perp c$ ilə müqayisədə daha intensiv olması zəncirvari quruluşdan irəli gələn anizotropluğun nəticəsidir. Müəyyən edilmişdir ki, $InGaSe_2$ kristalında dielektrik funksiyasının xəyali hissəsinin $1 \div 4$ eV intervalındakı strukturları anion və kationların yuxarı valent p - zonalarından, 7 eV ətrafındakı struktur

isə kationların valent s- zonalarından ən aşağı keçirici zonalara optik keçidlərlə bağlıdır.

4.0÷400 K temperatur intervalında kvazi-harmonik yaxınlaşmada $InGaSe_2$ kristalının molyar istilik tutumunun temperatur asılılığından müəyyən edilmişdir ki, 5 K-dən aşağı temperaturalarda $InGaSe_2$ birləşməsi üçün sabit həcmdə molyar istilik tutumunun qiymətləri Debayın T^3 kubik qanunu ilə dəyişir.

5.Xüsusi elektrik keçiriciliyinin, Holl və termo-e.h.q. əmsallarının temperatur asılılıqları öyrənilərək $InGaSe_2$ birləşməsinin qadağan olunmuş zonasının eni, sərbəst yükdaşıyıcıların konsentrasiyası, yürlüklüyü və keçiriciliyinin tipi təyin edilmişdir.

6.Birləşmənin volt-ampere xarakteristikasının müxtəlif temperaturalarda və statik rejimdə tədqiqi ilə yaddaşlı çevirici xassəyə malik olması aşkar edilmiş və çevirmənin baş verdiyi astana gərginliyinin temperaturun dəyişməsi ilə idarə olunmasının mümkünlüyü sübut edilmişdir.

7. $InGaSe_2$ birləşməsində fluoressensiya və AFV effektlər aşkar edilərək tədqiq edilmişdir. Göstərilmişdir ki, AFV effektin yaranmasına səbəb olan səs və elektromaqnit dalğalarının tezliklərini dəyişməklə spektral xarakteristikasını idarə etmək mümkündür.

Dissertasiya işinin mövzusunə aid çap olunmuş elmi işlərin

SIYAHISI

1.Годжаев Э.М., Джахангирли З.А., Насибова С.А., Алиева П.Ф. Исследование поверхности монокристаллов $InGaSe_2$ методом атомно-силовой микроскопии / AzTU “Nanotexnologiyalar və onların texnikada tətbiqi” mövzusunda I Beynəlxalq konfransın materialları, Bakı, 15-16 dekabr 2010, s.39-42.

2.Годжаев Э.М., Джахангирли З.А., Сафарова С.И., Гюльмаммедов К.Д., Алиева П.Ф. Экспериментальное определение и теоретический расчет структурных параметров соединений $TlGaSe_2$, $InGaTe_2$, $InGaSe_2$ // Milli Aviasiya Akademiyası, Elmi məcmuələr, 2011, cild 13, №1, s.19-27.

3.Годжаев Э.М., Джахангирли З.А., Гюльмаммедов К.Д., Халилова Х.С., Рамазанзаде А.М., Алиева П.Ф. Расчет эффективных масс электронов и дырок в тройных соединениях $TlGaTe_2$, $InGaTe_2$ и $InGaSe_2$ // Milli Aviasiya Akademiyası, Elmi məcmuələr, 2011, cild 13, №1, s.28-31.

4.Qocayev E.M., Xəlilova X.S., Əliyeva P.F. Hal tənliklərinin təməl prinsiplərindən $InGaSe_2$ birləşməsinin qəfəs parameterlərinin hesablanması

- / AzTU “Yüksək texnologiyalar və ali təhsil” Beynəlxalq elmi-texniki konfransın materialları, 15-16 dekabr, 2011, s.94-96.
- 5.Годжаев Э.М., Джахангирли З.А., Алиева П.Ф., Дадашов М.Т., Рагимов Р.С. Расчет из первых принципов координат атомов и параметров кристаллической решетки соединений $TlGaSe_2$, $InGaSe_2$ и $InGaTe_2$ // AzTU Elmi əsərlər Fundamental elmlər, 2012, №1 cild 41, s.23-26.
- 6.Годжаев Э.М., Джахангирли З.А., Алиева П.Ф. Электронная структура и оптические функции соединения $InGaSe_2$ / BDU, Fizika Problemləri İnstitutu “Fizikanın müasir problemləri” VI Respublika konfransının materialları, Bakı, 14-15 dekabr, 2012, s.47-51.
- 7.Gojaev E., Jahangirli Z., Alieva P., Khalilova Kh., Musaev T. // The Growth of Single Crystals of $InGaSe_2$ Compounds, Their X-Ray-Phase Analysis, Electronic Structure and Optical Functions” Open Journal of Inorganic Non-metallic Materials, January 2013, vol.3, №1, pp.1-5.
- 8.Годжаев Э.М., Алиева П.Ф., Рагимов Р.С., Абдурахманова У.С., Исмаилов А.А. Расчет зонной структуры и оптических функции тройных соединений $InGaSe_2$, $InGaTe_2$ // Материалы VIII Международного симпозиума. Фундаментальные и прикладные проблемы науки. Российская академия наук, Министерство обороны РФ, федеральное космическое агентство, Министерство ОН РФ, ВАК и др., сентябрь 2013г. с.59-66.
- 9.Qocayev E.M., Abdurəhmanova Ü.S., Əliyeva P.F. $InGaSe_2(Te_2)$ birləşmələrinin zona quruluşlarının hesablanması / VII Международная научно-техническая конференция «Микроэлектронные преобразователи и приборы на их основе» VII Beynəlxalq elmi-texniki konfransın materialları, Bakı-Sumqayıt, 27-29 noyabr, 2013, s.22-25.
- 10.Годжаев Э.М., Абдурахманова У.С., Алиева П.Ф. Расчет зонной структуры и оптических функций тройных соединений $InGaSe_2$, $InGaTe_2$ / BDU, Fizika fakultəsi Akademik V.M.Əsgərovun 80 illik yubileyinə həsr olunmuş “Fizikanın aktual problemləri” Beynəlxalq elmi konfransının materialları, 6 dekabr 2013, s.134-135.
- 11.Əliyeva P.F. $InGaSe_2$ birləşməsinin elektrofiziki xassələri // AzTU. Elmi əsərlər Fundamental elmlər, 2013, cild 2, №2, s.146-150.
- 12.Gojaev E.M., Alieva P.F., Aliyeva M.H., Safarov İ.A. Optical functions of $InGaSe_2$ //Azerb. journal of Physics, 2013, v. XIX, N4, section:En, pp.28-31.

13. Алиева П.Ф. Исследование термодинамических параметров соединения $InGaSe_2$ // Journal of Qafqaz University Physics, 2014, v.2, №1, pp.67-71.
14. Годжаев Э.М., Абдурахманова У.С., Алиева П.Ф. Акустофотовольтаический эффект в монокристаллах $InGaTe_2$ и $InGaSe_2$ // Радиотехника, 178/2014, с.52-58.
15. Rəhimov R.S., Əliyeva P.F. $InGaSe_2$ monokristalinin alınması və zona quruluşunun hesablanması // AMİ Xəbərlər Elmi-metodik jurnal, 2014, №3, s.153-156.
16. Gojaev E.M., Jahangirli Z.A., Abdurahmanova U.S., Ramazanzade A.M., Alieva P.F. Calculation of the atomic coordinates and the lattice parameters of compounds $InGaSe_2(Te_2)$ // Milli Aviasiya Akademiyası, Elmi məcmuələr, 2014, cild 16, №3, s. 38-41.
17. Əliyeva P.F. $InGaSe_2$ monokristalinin alınma texnologiyası və elektrik xassələri/ Doktorantların və gənc tədqiqatçıların XIX Respublika elmi konfransının materialları, ADİU, 7-8 aprel 2015, Bakı, s.34-36.
18. Алиева П.Ф. Получение и рентгенофазовый анализ $InGaSe_2$ / Gənc tədqiqatçıların III Beynəlxalq elmi konfransının materialları, Qafqaz Universiteti, Bakı-2015, s.59-60.
19. Годжаев Э.М., Рамазанов М.А., Джахангирли З.А., Абдурахманова У.С., Алиева П.Ф. Получение и рентгенофазовый анализ $InGaSe_2$ и $InGaTe_2$ // Вестник Бакинского университета, 2015, №1, с.109-117.
20. Abdurəhmanova Ü.S., Əliyeva P.F. $InGaSe_2$ və $InGaTe_2$ birləşmələrinin qəfəs parametrlərinin, elektron və dəşiklərin effektiv kütlələrinin hesablanması // Opto-, nanoelektronika, kondensə olunmuş mühit və yüksək enerjilər fizikası" IX Respublika konfransı, Bakı, BDU, Fizika Problemləri İnstitutu, 25-26 dekabr 2015, s.144-147.
21. Gojaev E.M., Alieva P.F., Nabiyev N.S. and Rahimov R.S. Current-voltage Characteristic of Bridgeman-Stockbarger $InGaSe_2$ Thin Films // Physical Science International Journal, 2016,9(1), pp.1-7.

Пюруза Фазиль кызы Алиева
Электрофизические, фотоэлектрические свойства, зонная
структура и оптические константы соединения $InGaSe_2$

Резюме

Диссертационная работа посвящена всестороннему исследованию тройного соединения $InGaSe_2$.

С использованием расчетов из первых принципов путем минимизации полной энергии, оптимизирована кристаллическая структура цепочечного полупроводника $InGaSe_2$. Определены все параметры уравнений состояния Мурнагана и Бирч-Мурнагана, описывающих равновесное состояние кристаллической структуры. На основе данных, полученных из расчетов и из уравнения состояния Мурнагана, построен график зависимости полной энергии от объема.

Вычисления электронных спектров по симметричным точкам зоны Бриллюэна, общее и проектированные на отдельные атомы парциальные плотности электронных состояний проводились методом функционала плотности в приближении LAPW. Обменно-корреляционное взаимодействие описывалось в приближении локальной плотности по схеме Ceperley-Alder-Perdew-Zunger. Результаты расчета показывают, что запрещенные в дипольном приближении переходы $T_3 - T_4$ определяют прямые переходы с активации энергией 0.85 эВ. Согласно симметрии кристалла $InGaSe_2$, в экстремумах, изоэнергетические поверхности являются эллипсоидами вращения и, поэтому, тензор обратных эффективных масс и для электронов, и для дырок имеют диагональный вид. Из первых принципов рассчитаны также оптические постоянные и выявлены их сильные поляризационные зависимости. Рассчитаны и анализированы свободная энергия, энтропия и температурная зависимость C_V данного кристалла. Результаты расчетов показывают, что ниже 5 К C_V меняется по T^3 кубическому закону Дебая.

Исследовались температурные зависимости удельной электропроводности, коэффициентов Холла и термо-э.д.с., концентрация и холловская подвижность носителей тока. Выявлено что соединение $InGaSe_2$ имеет эффект переключения и пороговое напряжение, регулируемое в нужное направление, в котором происходит переключение. В работе излагаются результаты экспериментального исследования эффекта флуоресценции и акустофотовольтаического эффекта.

Electro, photoelectric properties, band structure and optical constant connection *InGaSe₂*

Summary

The thesis is devoted to a comprehensive study of the triple InGaSe₂ connection.

Using calculations from first principles by minimizing the total energy, optimized crystal structure of the semiconductor chain InGaSe₂. We define all the parameters and equations of state Murnaghan Birch-Murnaghan describing an equilibrium state of the crystal structure. Based on the data obtained from the calculation of the equation of state and Murnaghan, plotted on the amount of total energy.

Calculations of the electronic spectra on symmetrical points of the Brillouin zone, and total engineered into individual atoms the partial electron density of states conducted by density functional approximation LAPW. The exchange-correlation interaction described in the local density approximation scheme Ceperley-Alder-Perdew-Zunger. The calculation results show that the forbidden transitions in the dipole approximation T₃ - T₄ identify direct transitions with the activation energy of 0.85 eV. According to InGaSe₂ crystal symmetry in the extremes energy surfaces are ellipsoids of rotation, and therefore, the tensor of reciprocal effective mass for electrons and holes are diagonal. From first principles also calculated the optical constants and revealed their Strongest polarization dependence. Calculated and analyzed the free energy, entropy and temperature dependence of the CV of the crystal. The calculation results show that less than 5 K C_V change by Debye T³ cubic law.

The temperature dependence of the electrical conductivity, Hall coefficient and the thermal emf., Concentration and Hall mobility of charge carriers. It revealed that the compound has an effect InGaSe₂ switching threshold voltage and can be adjusted in the right direction in which the switching occurs. The paper presents results of an experimental study of the fluorescence effect and acousto photovoltaic effect.

**НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК АЗЕРБАЙДЖАНА И НАУКИ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМЕНИ АКАДЕМИКА Г.М. АБДУЛЛАЕВА**

На правах рукописи

ПЮРУЗА ФАЗИЛЬ КЫЗЫ АЛИЕВА

**Электрофизические, фотоэлектрические свойства, зонная
структура и оптические константы соединения $InGaSe_2$**

2222.01 – Физика полупроводников

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

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

БАКУ – 2016