

CdGa₂Se₄ KRİSTALININ FONON SPEKTRİNİN TƏMƏL PRİNSİPLƏRDƏN TƏDQİQİ

Babazadə L.R., Cahangirli Z.A.

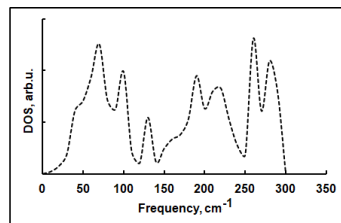
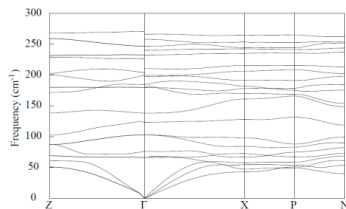
AR Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu

babazadeleman2@gmail.com

Sıxlıq Funksionalı Metodundan istifadə etməklə fonon energetik hallar sıxlığı və Brilluen zonasında fononların dispersiyası hesablanmışdır. Optik fononların hesablanmış tezlikləri infraqırmızı udma və Raman spektrlərindən eksperimental olaraq müəyyən edilmiş tezliklərə yaxşı uyğunluq təşkil edir. xy müstəvisində aşağı tezlikli optik fononların akustik fononlarla kəsişməsi müşahidə olunur.

$S_4^2 (I^4)$ fəza qrupunda kristallaşan $A^{II}B_2^{III}C_4^{VI}$ (A - Zn, Cd; B - In, Ga; C - S, Se, Te) birləşmələri sfalerit və xalkopirit strukturunda kristallaşan birləşmələrin kristal kimyəvi analoqlarıdır. Bu birləşmələr optik anizotropiya, ikiqat şüasınma, yüksək qeyri-xətti qavrayıcılıq əmsalları, yüksək fətohəssaslıq və parlaq lüminessensiya ilə xarakterizə olunur. Bu xassələr və böyük energetik qadağan zolağının olması bu birləşmələri yarımkeçirici cihazlarda istifadə üçün perspektivli materiallara çevirir [1, 2]. Bu məqalədə CdGa₂Se₄ kristalının Brillouin zonasının yüksək simmetrik nöqtələrində və xətlərində təməl prinsiplərdən hesablanmış fonon spektri və fonon hallarının sıxlığı təqdim olunur. Hesablamalar ABINIT proqram paketindən istifadə etməklə psevdopotensial metodu ilə xətti cavab yaxınlaşmasında Sıxlıq Funksionalı Metodu vasitəsilə aparılmışdır [3]. Şəkil 1-də uyğun olaraq Brilluen zonasında CdGa₂Se₄-də fonon dispersiyası və fonon hallarının sıxlığı göstərilmişdir. Şəkil 1-dən görüldüyü kimi fonon spektri üç oblastdan ibarətdir: CdGa₂Se₄ kristalında 51–130 sm⁻¹, 179–281 sm⁻¹ tezlik intervalında energetik halların yüksək sıxlığı, 120–180 sm⁻¹ tezlik intervalında isə energetik halların aşağı sıxlığı müşahidə olunur. Şəkil 1-dən həmçinin görünür ki, Brilluen zonasının Γ –Z istiqamətində (tetraqonal c oxu boyunca) optik fononlar zəif dispersiyaya malikdir, bu da tetraqonal ox boyunca fonon-fonon qarşılıqlı təsirinin zəif olduğunu göstərir. Bununla yanaşı, X–P–N istiqamətində fərqli bir mənzərə müşahidə olunur. Bu istiqamətdə akustik budaqlar aşağı tezlikli optik modlarla kəsişir. Sonuncu xy müstəvisində əhəmiyyətli fonon-fonon qarşılıqlı əlaqəsinin göstəricisidir. Beləliklə, yuxarıda deyilənlərdən belə nəticə çıxarmaq olar ki, xy müstəvisində fonon-fonon qarşılıqlı təsiri c tetraqonal oxu boyunca olan qarşılıqlı təsirdən daha böyükdür. Işığın infraqırmızı udma və Raman səpilmə spektrlərində eksperimental olaraq müşahidə edilən tezliklər və optik fononların hesablanmış tezlikləri yaxşı uyğunlaşır. Məlumdur ki, polyar kristallarda uzağa təsir edən elektrik sahəsi dipol optik rəqslərini eninə (TO) və uzununa (LO) optik modlara parçalanmasına səbəb olur. Hesablamalarımızda

LO–TO parçalanmasına səbəb olan uzağa təsir edən makroskopik sahələr dinamik matrisada Born effektiv yükü və yüksək tezlikli dielektrik sabitinin köməyi ilə nəzərə alınır. CdGa₂Se₄ kristalında Γ nöqtəsindəki bu parçalanmalar Şəkil 1–dən göründüyü kimi fonon modlarında kəsilmələr və sıçrayışlar kimi özünü göstərir.



Şəkl. 1. CdGa₂Se₄ kristalında fonon spektri və hal sıxlığı.

Ədəbiyyat:

1. A.N. Georgobiani, S.I. Radautsan, I.M. Tiginyanu. Semiconductors, 19, 193 (1985).
2. I.S. Yahia, M. Fadel, G.B. Sakr, F.Y. Hanoglu, S.S. Shenouda, W.A. Farooq. J. Alloys Compd., 509, 4414 (2011).
3. 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).