**TlGaTe2 KRİSTALI ÜÇÜN FONON HAL SIXLIĞININ VƏ MOLYAR İSTİLİK TUTUMUNUN TƏMƏL PRİNSİPLƏRDƏN HESABLANMASI**

*Cəfərova V.N.*

*Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutu, Bakı, Azərbaycan*

[*vina246@rambler.ru*](mailto:vina246@rambler.ru)

Tədqiq olunan *TlGaTe2* birləşməsi digər *TlSe* tipli birləşmələr içərisində ən zəif öyrənilmişidir. Bu kristallar texnikada tətbiq olunmaq üçün əlverişli materiallar olmaqla geniş texniki tətbiq imkanlarına malik birləşmələrdir.

Məqalədə, təməl prinsiplərdən tetraqonal *TlGaTe2* birləşməsi üçün Brillüen Zonasının (BZ) bütün simmetrik nöqtələri və xətləri üzrə fonon spektri hesablanmış, fonon dispersiya münasibətləri müəyyən edilmişdir. Hesablanmış fonon spektri əsasında fonon hal sıxlığı və 5÷500*K* temperatur intervalında sabit həcimdə molyar istilik tutumu təyin edilmiş və temperaturdan asılılılığı qurulmuş, əldə edilən eksperimental nəticələrlə müqayisə olunmuşdur.

*TlGaTe2* kvazi-birölçülü birləşməsinin fonon hal sıxlığını hesablamaq üçün əvvəlcə kristalı təşkil edən atomların tarazlıq vəziyyəti təməl prinsiplərdən hesablanmışdır. Hesasblamalar QE proqramlar paketi istifadə olunmaqla Funksional Sıxlıq Həyəcanlaşma Nəzəriyyəsinin Lokal Sıxlıq Yaxınlaşmasında Xətti Cavab Funksiyası metodu çərçivəsində 12 ədəd paralel qoşulmuş prosessor ilə yerinə yetirilmişdir. Atomların tarazlıq konfiqurasiyasının müəyyən edilməsi üçün Kohn-Sham tənlikləri həll olunmuşdur. Bu tənliklərin həlli üçün qoşma qradient minimallaşdırma metodu tətbiq edilmişdir. Baxılan halda tarazlıq struktur parametrlərinə gətirilənə qədər optimallaşdırma proseduru davam etdirilmişdir. Elektron-ion qarşılıqlı təsiri ultrasoft *Tl* üçünVanderbilt, *Ga* və *Te* üçün normanı qoruyan “Bachelet-Hamann-Schlüter qeyri-lokal ion psevdopotensialları ilə nəzərə alınmışdır. Dalğa funksiyalarının sıraya ayrılışında maksimal kinetik enerjisi 80 Ridberqi aşmayan müstəvi dalğalardan istifadə olunmuşdur. BZ üzrə inteqrallama Monkhorst-Pack sxemi üzrə 4x4x4 *k* dalğa vektorları qridi istifadə olunmaqla xüsusi nöqtələrə görə cəmləmə ilə əvəz olunmuşdur. Korelyasiya effektləri Ceperley-Alder-Perdew-Zunger sxemi üzrə nəzərə alınmışdır.

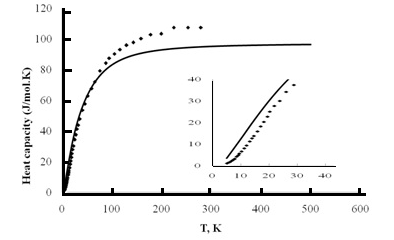
*TlGaTe2* kristalınınin termodinamik tarazlıq halında qəfəs və halkogen parametrlərinin hesablamadan alınmış qiymətləri və eksperimentdən məlum olan nəticələr verilmişdir (cədvəl).

Cədvəl

*TlGaTe2* kristalının təməl prinsiplərdən hesablanmış qəfəs və halkogen parametrləri

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Parametr | Hesablama | Eksperiment |
| *a*, Å | 8,55 | 8.43 |
| *c*, Å | 6,88 | 6.86 |
| *X* | 0,17 | 0.17 |

*TlGaTe2* üçün təməl prinsiplərdən hesablanmış fonon zona quruluşu əsasında təyin edilmiş fonon hal sıxlığı bu birləşmə üçün bir sıra temodinamik funksiyaları-sərbəst enerjini, molyar istilik tutumunu, entropiyanı, fonon sisteminin daxili enerjisini hesablamağa imkan verir. *TlGaTe2* üçün kvazi-harmonik yaxınlaşmada hesablanmış sabit həcmdə molyar istilik tutumunun temperatur asılılığı verilmişdir: bütöv əyri sabit həcmdə molyar istilik tutumunun (*CV*), fiqurlar işindən götürülmüş 4.2÷300*K* temperatur intervalında eksperimental təyin edilmiş sabit təzyiqdə molyar istilik tutumuna (*CP*) aiddir (şəkil).



**Şək.** *TlGaTe2*-nin molyar istilik tutumunun temperatur asılılığı:bütöv əyri *CV*-hesablama, fiqurlar *CP*–eksperiment.

Göründüyü kimi kvaziharmonikliyin ödənildiyi aşağı temperaturlar oblastında (5÷100*K*) molyar istilik tutumunun hesablamalardan alınan nəticələri ilə məlum eksperimental qiymətlər arasındakı uygunluq qənaətbəxşdir.

Müəyyən olunmuşdur ki, *TlGaTe2*-nin molyar istilik tutumunun temperatur asılılığında anharmoniklik ciddi şəkildə özünü göstərir. Bu səbəbdən təqribən otaq temperaturundan yuxarı temperaturlarda termodinamik funksiyaların düzgün hesablanması kristalda fonon-fonon qarşılıqlı təsirinin dəqiq nəzərə alınmasını tələb edir.

**AB INITIO STUDIES OF PHONON DENSITY OF STATES AND MOLAR HEAT CAPACITY OF TlGaTe2 CRYSTAL**

**Summary**

The work has been dedicated to the *ab initio* calculation of lattice constants, phonon density of states (DOS) and molar heat capacity of *TlGaTe2* using Quantum Espresso (QE) program package based on Density Functional Perturbation Theory (DFPT) in Local Density Approximation (LDA).

Tezisdə hər hansı bir istinadın və ona müvafiq ədəbiyyat siyahısının verilməsinə ehtiyac yoxdur!