

**СУЩЕСТВОВАНИЕ ОРТОРОМБИЧЕСКОЙ МОДИФИКАЦИИ  
КРИСТАЛЛОВ  $TlInS_2$  НА ДИАГРАММЕ СОСТОЯНИЯ СОСТАВ –  
ТЕМПЕРАТУРА-ДАВЛЕНИЕ И СПОСОБ ЕЕ ПОЛУЧЕНИЯ**

**А.И.НАДЖАФОВ\*, О.З.АЛЕКПЕРОВ\*\*, Г.Г.ГУСЕЙНОВ\*\***

*Институт радиационных проблем НАН Азербайджана\**

*AZ 1143, г.Баку, пр.Г.Джавида 31а*

*Институт физики НАН Азербайджана\*\**

*AZ 1143, г.Баку, пр. Г.Джавида 33*

Разработана технология выращивания, приведены результаты рентгенографических исследований и некоторых физических свойств монокристаллов орторомбической модификации соединения  $TlInS_2$ . В результате рентгенографических исследований (Лауэ, Вайсенберг, качание и порошковая диаграмма) определены параметры и сингония кристаллической решетки выращенных кристаллов. Установлены следующие значения параметров решетки-  $a=6.88\text{Å}$ ,  $b=14.04\text{Å}$ ,  $c=4.02\text{Å}$ , к.ч.-  $z=4$  и расчетной плотности  $d_p=6.59\text{г/см}^3$ . Определена пр.гр. как  $R\bar{2}2_1$ . Приведены результаты исследований диэлектрической проницаемости в интервале температур 170-300К и фотопроводимости при 300К. Установлено, что орторомбическая фаза  $TlInS_2$  является широкозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны несколько большей ( $E_g = 2.52 \pm 0.01\text{эВ}$ ), чем моноклинная модификация.

## ВВЕДЕНИЕ

Для соединения  $TlInS_2$  установлено пять структурных модификаций: моноклинная (МКМ) [1,2], орторомбическая (ОРМ) [1], тетрагональная [3], гексагональная (ГМ) [4,5] и триклинная [6], однако на диаграммах состояния р-Т и Т-х области существования всех указанных модификаций не определены. Поэтому целенаправленное получение той или иной модификации, за исключением моноклинной, затруднено. Исследуя диаграмму состояния системы  $TlS-InS$ , авторы [7] обнаружили единственный фазовый переход при температуре 905К, интерпретируя его как переход гексагонально-моноклинный. Авторы [8], исследуя область гомогенности соединения  $TlInS_2$ , установили, что на ее основе образуется широкая область гомогенности доходящая до 8,0 мол.%. Также установлено, что максимум ликвидуса на диаграмме состояния соответствует составу 50,4 мол.%  $Tl_2S$  и температуре  $1038 \pm 3\text{К}$ .

Известно, что кристаллизация стехиометрического расплава  $TlInS_2$  (метод Бриджмена–Строкбаркера) приводит к образованию только МКМ (пр.гр.  $C2/c$ ). Переход  $TlInS_2$  в другие модификации осуществляется на базе моноклинного кристалла путем одновременного воздействия температуры  $T < T_{пл}$  и давления  $p$ . Было показано [4], что МКМ  $TlInS_2$  в условиях 30 кбар и 573К превращается в метастабильную ромбоэдрическую фазу (пр.гр.  $R\bar{3}m$ ,  $a=3,83\text{Å}$ ;  $c=22,23\text{Å}$ ;  $Z=3$ ). При температуре 673К и 30 кбар как моноклинная, так и ромбоэдрическая модификации превращаются в ГМ (пр.гр.  $R6_3/mmc$ ;  $a=3,83\text{Å}$ ;  $c=14,88\text{Å}$ ;  $Z=2$ ), которая устойчива до температуры 693К. При этой температуре эти модификации превращаются обратно в МКМ. По данным [9] переход из ГМ в МКМ является эндотермическим процессом и при нормальном давлении происходит в результате длительного отжига при  $T=785\text{К}$ .

Наши попытки обнаружения тетрагональной и орторомбической модификаций на р-Т диаграмме стехиометрического  $TlInS_2$  не привели к

положительному результату. Однако из факта наличия тетрагональной, орторомбической и триклинной модификаций и из бертоллидного характера  $TlInS_2$  следует, что указанные модификации могут являться не только функцией  $p$  и  $T$ , но и состава ( $x$ ) [10]. Иными словами свободная энергия указанных фаз является функцией  $p$ ,  $T$  и  $x$ . Поэтому в данной работе исследована возможность образования различных модификаций в нестехиометрических составах  $TlInS_2$ . С этой целью были использованы кристаллы  $TlInS_2$  как с избытком, так и с дефицитом аниона.

В данной работе исследуется влияние избытка аниона на образование новых модификаций и, в частности, установлено, что орторомбическая модификация  $TlInS_2$  так же образуется при избытке аниона. Приводятся технология получения, результаты рентгенографических, фотоэлектрических и диэлектрических исследований образцов монокристалла орторомбической фазы  $TlInS_2$ . Отметим, что предварительные исследования [5] показали, что изменение стехиометрии за счет избытка  $Tl$  и  $In$  не приводит к образованию орторомбической фазы. Известно также, что избыток серы при кристаллизации из расплава не приводит к образованию других модификаций кроме моноклинной. Как будет установлено далее, область существования ОРМ находится при температурах значительно ниже  $T_{пл}$ . Ранее в работе [11] экспериментально было установлено, что при температурах ниже 775К длительный отжиг в парах серы при давлениях до 3÷5ат моноклинных кристаллов  $TlInS_2$  не приводит к образованию других модификаций, а происходит лишь заполнение дефектов серы в анионной подрешетке кристалла. В связи с чем в данной работе эксперименты с избытком серы были проведены в температурном интервале  $775K < T < T_{пл}$ .

## ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ И МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ

Кристаллы ОРМ  $TlInS_2$  выращивались методом сублимирования моноклинных кристаллов в атмосфере серы в температурном интервале 815÷865К. Температурный градиент имел значение в пределах 30-50К. Погрешность температуры в печи была  $\pm 2K$ . Регулирование и автоматическую поддержку температуры производили с помощью регулятора ВРТ-2.

Эксперименты проводились в эвакуированных до  $1.310^{-2}$ Па кварцевых ампулах. Количество исходного вещества составляла 3÷4г. С целью увеличения эффективности процесса использованы измельченные до размеров  $\sim 1 \times 1 \times 1 \text{ мм}^3$  монокристаллические образцы  $TlInS_2$ .

Количество избыточной серы рассчитывалось таким образом, чтобы при температуре эксперимента давления в ампуле не превышала 3-5 атм. Расчеты производили согласно уравнению Менделеева-Клайперона  $PV = m/\mu RT$  с учетом объема ампулы и числа атомов серы в молекуле ( $S_4$  при  $800K < T < 900K$ ). Из-за низкой скорости протекания твердофазного перехода опыты продолжались в течение 4÷5 недель.

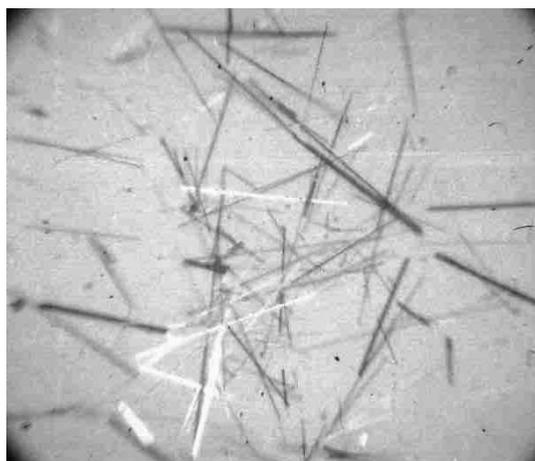
Лауэграммы, рентгенограммы качания и Вайсенбергограммы выращенных монокристаллов снимались на установке УРС-60 с помощью камеры РКОП-А и гониометра РГНС. Порошкограммы кристаллов снимались на дифрактометре ДРОН-2,0 ( $Cu K_\alpha$ ) в интервале углов  $4^\circ < \theta < 35^\circ$ . Расчеты межплоскостных расстояний проводились по формуле для орторомбической структуры приведенной в [12].

Диэлектрические измерения проводили в интервале температур 120÷300К с помощью моста переменного тока Е7-8 на частоте 1кГц и Е7-12 на частоте 1МГц. Скорость температурного сканирования составляла  $\sim 0,1$  К/мин. Рассчитанные межплоскостные расстояния ( $\alpha$ ) и их индексы ( $hkl$ ) приведены в Таблице.

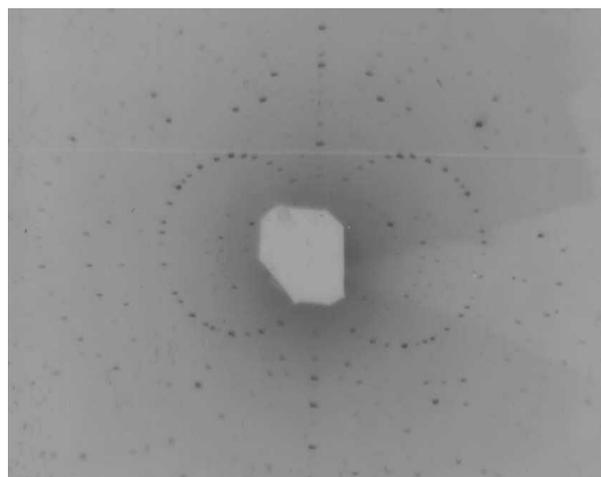
Фотопроводимость образцов исследовали при комнатной температуре в режиме постоянного тока с помощью монохроматора МДР-23. В качестве источника излучения использовали лампу накаливания мощностью 400 Вт.

### РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

В результате экспериментов установлено, что ОРМ  $TlInS_2$  образуется в температурном интервале  $815 < T < 865 K$ . Рост кристаллов прекращается при  $T > 875 K$ . При отсутствии градиента температуры рост кристаллов ОРМ происходит на исходном моноклинном кристалле. Рост ОРМ, как правило, имеет место параллельно слоям вдоль направления оси  $b$  исходного моноклинного кристалла. При значении  $\Delta T \approx 40 \div 50 K$  наблюдается медленный процесс сублимирования моноклинного  $TlInS_2$  и рост кристаллов ОРМ на некотором расстоянии от источника на стенках ампул, где  $T \approx 850 \div 855 K$ . При использовании сплава  $TlInS_2$  в замен образцов монокристаллов МКМ весь сплав постепенно превращается в хаотически ориентированные колонны. Кристаллы вырастают в виде колонн желтых, прозрачных для видимого света призматических игл, как правило, с усеченными  $\sim 45^\circ$  окончаниями (Рис.1). Отметим, что описанный процесс роста ОРМ внешне напоминает процесс газотранспортного роста кристалла, в котором транспортирующим агентом является сама сера. Максимальные размеры кристаллов составляли  $15 \times 0,03 \times 0,03 \text{ мм}^3$ . Процесс превращения МКМ в ОРМ без участия серы не происходит, а при ее количествах, обеспечивающих давление паров меньше  $3 \text{ ат}$ , значительно замедляется.



**Рис. 1.**  
Кристаллы орторомбической модификации  $TlInS_2$ .



**Рис. 2.**  
Лауэграмма монокристалла орторомбической модификации  $TlInS_2$ .

Кристаллические иглы эластичны на изгиб и хрупки в поперечных направлениях. При нажатии легко скалываются вдоль  $\langle 010 \rangle$  в направлениях перпендикулярных  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 001 \rangle$  на иглы меньшего поперечного размера. Электрические измерения показали, что кристаллы проявляют дырочный тип проводимости и имеют удельное сопротивление порядка  $10^6 \div 10^7 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ , что несколько меньше удельного сопротивления кристаллов МКМ -  $10^8 \div 10^{10} \text{ Ом}\cdot\text{см}$ .

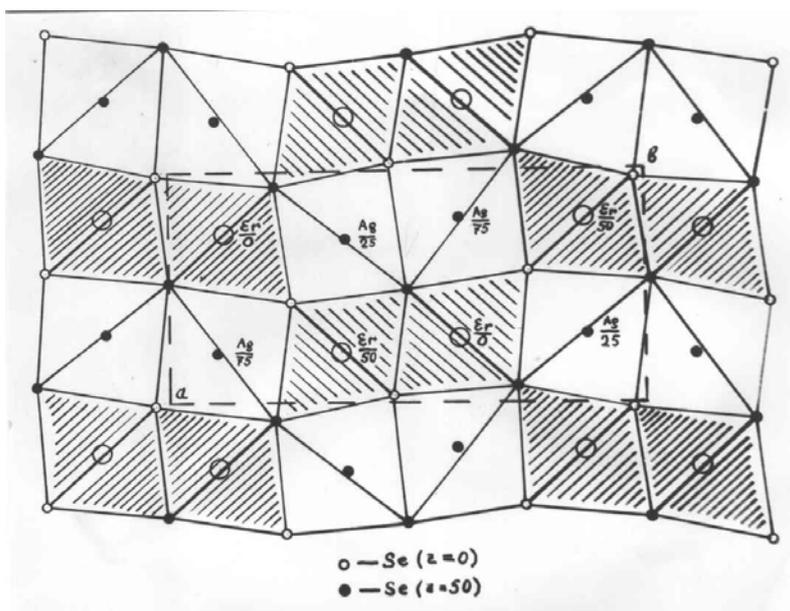
В таблице представлены экспериментальные и расчетные значения межплоскостных расстояний и индексы Мюллера кристаллов ОРМ  $TlInS_2$ , полученные из порошкограмм. Как видно из таблицы, картина дифракции кристалла достаточна сложная. На основании сравнения расчетных и

экспериментальных значений межплоскостных расстояний и идентификации рефлексов, согласно известной методике [12,14], установлена принадлежность кристаллов к орторомбической структуре. Анализ рентгенограмм (дифрактограмма, Вайсенберг и качание) от порошка и монокристаллических образцов позволил определить следующие параметры элементарной ячейки:  $a=6,88\text{\AA}$ ;  $b=14,04\text{\AA}$ ;  $c=4,02\text{\AA}$ ; значение  $Z=4$  и рентгенографическую плотность  $d_p=6,59\text{ г/см}^3$ . Индексацией рентгенограмм и анализом закономерных погасаний рефлексов была установлена пространственная группа  $P222_1$  для ОРМ  $\text{TlInS}_2$ . Параметры для орторомбической модификации  $\text{TlInS}_2$ , приведенные в [1], несколько расходятся с аналогичными значениями, полученными нами:  $a=6,56\text{\AA}$ ;  $b=14,92\text{\AA}$ ;  $c=3,81\text{\AA}$ ;  $Z=4$ ; пр. гр.  $C222_1$ ;  $d_p=6,82\text{ г/см}^3$ .

На Рис.2 показана Лауэграмма выращенного монокристалла ОРМ  $\text{TlInS}_2$  расположенного перпендикулярно направлением  $\langle 010 \rangle$  к пучку излучения. Четкость расположения точек и отсутствие на Лауэграмме каких либо ореолов свидетельствует о высоком качестве выращенных кристаллов. На ней отчетливо отражена ось симметрии 2-го порядка. Предполагаем, что ОРМ  $\text{TlInS}_2$  изоструктурна орторомбической структуре соединения  $\text{AgErSe}_2$  [13], имеющей следующие кристаллографические данные:

$a=6,87\text{\AA}$ ;  $b=13,79\text{\AA}$ ;  $c=4,17\text{\AA}$ ; пр.гр.  $P2_1 2_1 2_1$ ;  $Z=4$ ;  $d_p=7,32\text{ г/см}^3$ .

Данная структура состоит из тетраэдров  $\text{AgSe}_4$  и октаэдров  $\text{ErSe}_6$ , расположенных в порядке указанном на Рис.3, где соответствующие цифры при атомах Er и Ag указывают их координаты по оси "с" (в направлении перпендикулярном плоскости рисунка). При этом атомы Ag формируют каркас из сдвоенных лент тетраэдров соединенных общими вершинами, расположенных перпендикулярно оси "с". Атомы Er, аналогичным образом занимая октаэдрические пустоты, также формируют каркас из сдвоенных октаэдров  $\text{ErSe}_6$  соединенных общими ребрами. Следовательно, в полученном нами орторомбическом  $\text{TlInS}_2$  тетраэдры  $\text{InS}_4$  и октаэдры  $\text{TlS}_6$  расположены в аналогичном порядке. Данный тип структуры является колоночной (цепочечной) структурой. Различие в пространственных группах  $\text{AgErSe}_2$  и  $\text{TlInS}_2$  может быть обусловлено тем, что атомы таллия, имея больший ионный радиус, чем атом Er ( $r_{\text{Tl}}=1,36\text{\AA}$ ;  $r_{\text{Er}}=0,85\text{\AA}$ ) могут смещаться относительно центров октаэдров. Возможен и другой вариант влияния увеличения ионного радиуса, приводящий к деформированию октаэдров  $\text{TlS}_6$  и изменению координации атома Tl от 6 к 7. Из сравнения размеров атомов Ag ( $r=1,13\text{\AA}$ ) и In ( $r=0,92\text{\AA}$ ) становится ясным, что тетраэдры  $\text{AgSe}_4$  будут более упорядоченными вследствие их замены атомами In.



деформированию октаэдров  $\text{TlS}_6$  и изменению координации атома Tl от 6 к 7. Из сравнения размеров атомов Ag ( $r=1,13\text{\AA}$ ) и In ( $r=0,92\text{\AA}$ ) становится ясным, что тетраэдры  $\text{AgSe}_4$  будут более упорядоченными вследствие их замены атомами In.

**Рис. 3.**

Проекция структуры орторомбической модификации  $\text{AgErSe}_2$  на плоскость  $\langle 010 \rangle$ .

Известно, что соединение  $TlInSe_2$ , которое отличается от  $TlInS_2$  заменой аниона S на Se, при росте из расплава ( $T_{пл}=1038K$ ) кристаллизуется в тетрагональной модификации и является кристаллом с цепочечной структурой. Поэтому естественным было бы ожидать существования такой структуры  $TlInS_2$ , которая так же является цепочечной. Дело в том, что при стехиометрическом составе диаграммы состояния при температуре кристаллизации  $TlInSe_2$  соответствует цепочечной тетрагональной структуре, а  $TlInS_2$  -моноклинной слоистой. Отметим, что тетрагональная модификация  $TlInS_2$ , впервые полученная в [3], так же является цепочечной.

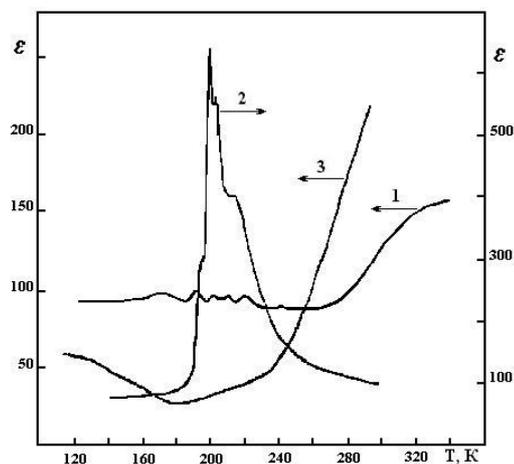
### Таблица

Углы дифракций, экспериментальные и расчетные значения межплоскостных расстояний и индексы Мюллера кристаллов орторомбической модификации  $TlInS_2$ .

№	$\Theta^0$	d, Å	I отн	$d_{расч.}, \text{Å}$	$\Delta d$	h k l
1	9,00	4,9139	23	4,9136	0,0003	120
2	11,16	3,9716	31	3,8696	0,102	130
3	11,61	3,8164	35	3,8647	0,0483	011
4	12,15	3,6552	23	3,67	0,0148	040
5	12,90	3,4432	26	3,4400	0,0032	200
6	13,20	3,3663	70	3,3694	0,0031	111
7	13,90	3,1999	35	3,1113	0,0886	121
8	17,68	2,5311	6	2,5695	0,0384	211,201,150
9	18,20	2,4611	28	2,4680	0,0069	141,221
10	19,00	2,3611	23	2,3400	0,0211	060
11	19,90	2,2584	50	2,2633	0,0049	310
12	20,50	2,1950	28	2,2153	0,0203	160
13	21,15	2,1314	43	2,1752	0,0438	250
14	22,50	2,0087	19	2,0057	0,003	002,070,330
15	23,45	1,9324	13	1,9347	0,0023	260,164,161,102
16	23,90	1,8974	13	1,9131	0,0157	251
17	24,40	1,8608	38	1,9113	0,0505	112
18	26,75	1,7084	19	1,7005	0,0079	180,400,410
19	29,10	1,5806	100	1,5813	0,0007	401
20	31,75	1,4618	28	1,4667	0,0055	281,450
21	33,30	1,4001	14	1,4040	0,0039	0.10.0
22	34,80	1,3469	9	1,3400	0,0069	003,520
23	36,20	1,3015	38	1,3012	0,0003	412,470,1.10.1

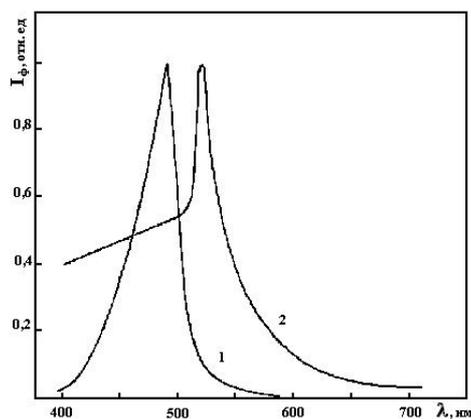
Естественно, что физические свойства ОРМ должны отличаться от свойств других модификаций. Ниже мы приводим результаты измерений некоторых параметров для ОРМ  $TlInS_2$ . Так например, зависимость диэлектрической проницаемости  $\epsilon(T)$  от температуры является наиболее характерной для МКМ  $TlInS_2$ , из-за наличия сегнетоэлектрического фазового перехода в области 190÷240K и, как следствие этого, аномальное поведение этой величины. На Рис.4 представлена кривая температурной зависимости диэлектрической проницаемости кристалла ОРМ  $TlInS_2$  (кривая 1). Для сравнения там же приведена аналогичная кривая для исходного моноклинного кристалла. Как видно из Рис.4, ход кривой

зависимости  $\epsilon(T)$  для орторомбической фазы отличается практически постоянством в диапазоне 120-270К, что свидетельствует об отсутствии хорошо известного фазового перехода, имеющего место в кристаллах МКМ (кривая 2). Возрастание диэлектрической проницаемости при  $T > 270\text{К}$  на кривой  $\epsilon(T)$  предположительно может быть связано как с изменением проводимости кристалла при повышении температуры, так и с возможным фазовым переходом при более высоких температурах. Такой же рост диэлектрической проницаемости имеет место и для кристаллов гексагональной структуры (кривая 3) при  $T > 240\text{К}$ .



**Рис. 4.**

Зависимость диэлектрической проницаемости от температуры для различных модификаций кристаллов  $\text{TlInS}_2$ : 1-орторомбический; 2-моноклинный; 3-гексагональный.



**Рис. 5.**

Спектральная зависимость фотопроводимости кристаллов  $\text{TlInS}_2$ : 1-орторомбический; 2-моноклинный.

На Рис.5 представлена кривая спектральной зависимости фотопроводимости монокристалла орторомбической фазы (кривая 1) при 300К. Для сравнения там же представлена кривая 2 зависимости  $I_{\phi}(\lambda)$  для МКМ  $\text{TlInS}_2$ . Область спектральной чувствительности ОРМ находится в пределах длин волн 400÷600нм. В отличие от моноклинных кристаллов, где максимум фотопроводимости находится при  $522 \pm 3\text{нм}$ , для кристаллов ОРМ максимум фотопроводимости наблюдается при  $487 \pm 3\text{нм}$ . Спектр фотопроводимости ОРМ отличается более резким длинноволновым краем и спадом фоточувствительности в ультрафиолетовой части спектра по сравнению с МКМ. Исследование люкс-амперных характеристик ОРМ показало, что ее фоточувствительность имеет значительно малые значения по сравнению с моноклинной и гексагональной фазами. Например, в образцах ОРМ при освещенностях 800÷900лк значения  $R_T/R_C \approx 2$ , что на порядок меньше, чем в МКМ. Из максимума кривой спектральной фотопроводимости для кристаллов ОРМ была определена ширина запрещенной зоны, имеющая значение  $E_g = 2,52\text{эВ}$  что на 0.2эВ больше, чем для МКМ кристаллов  $\text{TlInS}_2$ .

## ВЫВОДЫ

1. Установлено, что на диаграмме состояния  $p$ - $T$ - $x$  существует орторомбическая модификация  $\text{TlInS}_2$ , являющаяся кристаллом цепочечной

структуры, которая получается из моноклинной при длительном отжиге в парах серы при давлении  $3\div 5$  ат и температурах  $815\div 865$  К.

2. Определены кристаллографические параметры орторомбической модификации  $TlInS_2$ :  $a=6,88\text{\AA}$ ;  $b=14,04\text{\AA}$ ;  $c=4,02\text{\AA}$ ;  $Z=4$ ;  $d_p=6,59$  г/см<sup>3</sup> пр.гр.  $P222_1$ .
3. Установлено, что кристаллы орторомбической модификации  $TlInS_2$  устойчивы в обычных условиях и не претерпевают фазовых превращений в температурном диапазоне  $120\div 300$  К.
4. Кристаллы орторомбической модификации  $TlInS_2$  являются широкозонным полупроводником с  $E_g=2,52\pm 0,01$  эВ.

1. D.Muller, F.Poltmann, H.Hahn, *Zs. Naturforschung (b)*, **29** (1974) 117.
2. W.Henkel, H.D.Hochheimer, C.Carlone, A.Werner, A.Ves, H.G Schnering, *Phys. Rev.(B)*, **26** (1982) 3211.
3. H.Hahn, B.Wellman, *Die Naturwissenschaften*, **54** № 2 (1967) 42.
4. K.-J.Range, G.Engert, W.A.Muller, A.Weiss, *III.Zs. Naturforschung (b)*, **29** (1974) 181.
5. С.Н.Алиев, А.И.Наджафов, О.З.Алекперов, *Неорг. Материалы*, **27** (1991) 621.
6. T.I.Isaacs, *Zs. Crystallograpy*, **141** (1975) 104.
7. Г.Д.Гусейнов, Э.М.Керимова, С.М.Бидзинова, Г.Г.Гусейнов, М.З.Исмаилов, Э.М.Годжаев, *Сб. некоторые вопросы экспериментальной и теоретической физики. - Баку, Элм*, (1977) 155.
8. М.И.Головей, В.И.Ткаченко, И.М.Некрасова, Г.Н.Шпырко, Ю.В. Ворошилов, *Всесоюзная конф.по химии, физике и техн. применению халькогенидов. Тезисы докл.-Баку*, (1979) 37.
9. H.D.Hochheimer, E.Gmelin, Ch.Mensing, L.Vicriam, K.D.Kleuer, H.G.Schering, *Phys. Stat. sol (a)*, **88** (1985) 43.
10. F.A. Kroger, *The chemistry of imperfect crystals, Amsterdam*, (1964).
11. С.Н.Алиев, А.И.Наджафов, О.З.Алекперов, *Неорг. Материалы*, **28** (1992) 1566.
12. Г.Б.Бокий, М.А. Порай-Кошиц, *Рентгеноструктурный анализ, Под.ред. Н.В. Белова Изд.во МГУ, М.*, (1964).
13. M.Julien-Pourol, M.Guittard. *Ann.Chim.*, **8** (1973) 139.
14. Л.Азаров, М.Бургер, *Метод порошка в рентгенографии. М.: ИЛ*, (1961) 363.

## **$TlInS_2$ KRİSTALININ ORTOROMBİK MODİFİKASİYASININ TƏRKİB-TƏZYİQ-TEMPERATUR HAL DİAQRAMINDA MÖVJUDLUĞU VƏ ONUN ALINMASI**

**A.İ. NƏJƏFOV, O.Z. ƏLƏKBƏROV, Q.Q. HÜSEYNOV**

$TlInS_2$  birləşməsinin ortorombik modifikasiyalı monokristallarının yetişdirmə texnologiyası işlənib hazırlanmış, onların rentgenoqrafik tədqiqi və bəzi fiziki xassələrinin tədqiqinin nəticələri verilmişdir. Rentgen tədqiqatları nəticəsində (Lauye, Vaysenberg, yellənjək və toz difraktoqramları) yetişdirilmiş kristalların qəfəs sabitləri və sinqoniyası müəyyən edilmişdir. Qəfəs parametrlərinin aşağıdakı qiymətləri müəyyən edilmişdir:  $a=6,88\text{\AA}$ ,  $b=14,04\text{\AA}$ ,  $c=4,02\text{\AA}$ ,  $Z=4$  rentgen sıxlığı  $d_c=6,59\text{g/sm}^3$ . Alınmış kristal üçün  $P222_1$  fəza qrupu müəyyən edilmişdir. Dielektri nüfuzluğunun  $170\div 300$  K intervalında temperatur asılılığı və fotokeçirijiliyin  $300$  K də spektral asılılığı verilmişdir Müəyyən edilmişdir ki,  $TlInS_2$  kristalının ortorombik modifikasiyası monoklin kristallara nisbətən daha böyük qadağan **олунмуш** zonalı ( $E_g=2,52\pm 0,01$  eV) yarımkeçirijidir.

**EXISTENCE OF THE ORTHORHOMBIC MODIFICATION OF TlInS<sub>2</sub> CRYSTALS IN THE PHASE DIAGRAM COMPOSITION- PRESSURE-TEMPERATURE AND IT'S GROWTH METHOD**

**A.I.NAJAFOV, O.Z.ALEKPEROV, G.G.GUSEYNOV**

The growth technology, the results of X-ray investigations and some physical properties of single crystals of orthorhombic modification of TlInS<sub>2</sub> were given. From the X-ray investigations (Laue, Waisenberg hunt effect and powdergramm) the lattice parameters and syngony of the grown crystals were defined. The following values of parameters of the lattice-  $a=6.88\text{\AA}$ ,  $b=14.04\text{\AA}$ ,  $c=4.02\text{\AA}$ ,  $Z=4$  and calculated density  $d_c=6.59\text{g/sm}^3$  were established. The space group was defined as P222<sub>1</sub>. The results of dielectric constant in the temperature range 170÷300K and photoconductivity spectral dependence at T=300K were presented. It was established that orthorhombic modification of TlInS<sub>2</sub> was a slightly (~0.2eV) higher band gap  $E_g=2.52\pm 0.2\text{eV}$  semiconductor than the monocline one.

Редактор:Г.Аждаров