

УДК 538.9

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-8>**Мирон РУДИШ**

кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри експериментальної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 8, м. Львів, Україна, 79000; науковий співробітник навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-5431-5652>
SCOPUS-AUTHOR ID: 55858314300

Андрій КАШУБА

доктор фізико-математичних наук, доцент кафедри загальної фізики, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандени, 12, м. Львів, Україна, 79000
ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-3650-3892>
SCOPUS-AUTHOR ID: 57188864596

Бібліографічний опис статті: Рудиш, М., Кашуба А. (2024). Вплив гідростатичного тиску на електронну структуру кристала CuAlTe_2 . *Фізика та освітні технології*, 2, 56–64, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-8>

ВПЛИВ ГІДРОСТАТИЧНОГО ТИСКУ НА ЕЛЕКТРОННУ СТРУКТУРУ КРИСТАЛА CuAlTe_2

У цій роботі вперше проведено теоретичне дослідження структурних та фізичних властивостей кристала CuAlTe_2 під дією зовнішніх гідростатичних тисків. Для цього здійснено комплекс комп'ютерних обчислень, що включає розрахунок кристалічної структури та властивостей досліджуваного матеріалу. Структура кристала визначалась використовуючи метод Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шенно, за допомогою якого отримувались оптимізовані параметри ґратки та координат атомів. Дослідження електронних властивостей кристала і їх трансформації за дії гідростатичних тисків здійснювались шляхом моделювання з перших принципів. Для цього в рамках теорії функціоналу густини (DFT) проведено розрахунки зонно-енергетичної структури кристала $E(k)$. Обмінно-кореляційна взаємодія описувалась за допомогою узагальненого градієнтного наближення. Основна увага приділена вивченню зміни кристалографічних параметрів під тиском, що дозволяє зрозуміти особливості поведінки цього матеріалу в умовах високих тисків. У роботі застосовувались гідростатичні тиски в межах 0–5 ГПа. Результати показують, що під впливом гідростатичного тиску відбувається поступове зменшення об'єму елементарної комірки, що добре узгоджується з теоретичними передбаченнями та описується рівнянням стану Мурнагана. На основі цього рівняння визначено об'ємний модуль пружності B та його першу похідну по тиску B' , що характеризують стійкість кристала до деформацій. З'ясовано, що прикладання тиску зумовлює значну тетраедричну деформацію кристалічної ґратки CuAlTe_2 , що може впливати на його фізичні властивості, зокрема на електронну структуру. Важливо, що зростання тиску призводить до збільшення ширини забороненої зони E_g , що може бути корисним для потенційних застосувань матеріалу у напівпровідникових технологіях. Розрахунки показали, що зміна значення E_g при підвищенні тиску відповідає квадратичній залежності, що дозволяє точно описати поведінку ширини забороненої зони у діапазоні застосованих тисків. Отримані результати можуть бути корисними для подальшого застосування CuAlTe_2 у високотехнологічних приладах, де необхідні матеріали з можливістю регулювання ширини забороненої зони під впливом зовнішніх умов.

Ключові слова: халькопїрит, гідростатичний тиск, зонна структура, густина станів, теорія функціоналу густини.

Myron RUDYSH

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at the Department of Experimental Physics, Ivan Franko National University of Lviv, 8 Kyrylo and Mefodii str., Lviv, Ukraine, 79000; Research Fellow of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-5431-5652>

SCOPUS-AUTHOR ID: 55858314300

Andrii KASHUBA

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at the Department of General Physics, Lviv Polytechnic National University, 12 Banders str., Lviv, Ukraine, 79000

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-3650-3892>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57188864596

To cite this article: Rudysh, M., Kashuba A. (2024). Vplyv hidrostatychnoho tysku na elektronnu strukturu krystalu CuAlTe_2 [Influence of hydrostatic pressure on the electronic structure of the CuAlTe_2 crystal]. *Physics and Educational Technology*, 2, 56–64, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-8>

INFLUENCE OF HYDROSTATIC PRESSURE ON THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE CuAlTe_2 CRYSTAL

In this paper, for the first time, a theoretical study of the structural and physical properties of the CuAlTe_2 crystal under the influence of external hydrostatic pressures was carried out. For this, a complex of computer calculations was carried out, which included the calculation of the crystal structure and properties of the material under study. The crystal structure was determined using the Broyden-Fletcher-Goldfarb-Schanno method, which was used to obtain optimized lattice parameters and atomic coordinates. The study of the electronic properties of the crystal and their transformation under the action of hydrostatic pressure was carried out by modeling from the first principles. For this purpose, calculations of the band-energy structure of the crystal $E(k)$ were carried out within the framework of the density functional theory (DFT). The exchange-correlation interaction was described using the generalized gradient approximation. The main attention is paid to the study of changes in crystallographic parameters under pressure, which allows us to understand the peculiarities of the behavior of this material under the influence of high pressure. Hydrostatic pressures in the range of 0–5 GPa were used in the work. The results show that under the influence of hydrostatic pressure there is a gradual decrease in the volume of the unit cell, which is in good agreement with theoretical predictions and is described by the Murnaghan equation of state. On the basis of this equation, the bulk modulus of elasticity B and its first pressure derivative B' , which characterize the crystal's resistance to deformations, are determined. It was investigated that the application of pressure causes a significant tetrahedral deformation of the CuAlTe_2 crystal lattice, which can affect its physical properties, in particular, the electronic structure. Importantly, an increase in pressure leads to an increase in the band gap E_g , which can be useful for potential applications of the material in semiconductor technology. Calculations showed that the change in the value of E_g with increasing pressure corresponds to a quadratic dependence, which allows us to accurately describe the behavior of the gap width in the range of applied pressures. The obtained results may be useful for the further application of CuAlTe_2 in high-tech devices, where materials with the ability to adjust the band gap under the influence of external conditions are needed.

Key words: *chalcopyrite, hydrostatic pressure, band structure, density of states, density functional theory.*

Вступ. Потрійні напівпровідникові кристали групи I-III-VI₂, де I = Cu, Ag, III = Al, Ga, In, VI = S, Se, Te, є відомими матеріалами, що походять від природнього мінерала халькопіриту – CuFeS_2 . На сьогодні відомо, що представники цієї групи є цікавими з практичної точки зору через великий коефіцієнт поглинання, прозорість у широкій спектральній області (зокрема в ІЧ ділянці спектра), відсутність центра симетрії (Honeyman, 1971; Koschel, 1975; Matsushita, 1992). Матеріали знаходять застосування в оптоелектроніці, фотовольтаїці, нелінійній

оптиці, сенсорній техніці, тощо. Зокрема їхнє використання у вигляді тонких плівок у поєднанні з оптимальною шириною забороненої зони робить їх привабливими для застосування у сонячній енергетиці (Benseddik, 2020; Kowsar, 2020) та фотокаталізі (Mondal, 2018; Regulacio, 2016). Дослідженню фізико-хімічних властивостей кристалів групи халькопіриту присвячена низка експериментальних та теоретичних робіт (Huang, 2021; Boyd, 1971; Rudysh, 2022; Rudysh, 2021; Rudysh, 2020). Відомо, що деякі матеріали цієї групи володіють фазовими переходами за

дії гідростатичного тиску, що змінює симетрію структури кристала та його властивості (Rudysh, 2022; Bovornratanarak, 2010).

Серед представників групи I-III-VI₂ цікавими і малодослідженими є кристали CuAlTe₂. Раніше у роботі (Gudelli, 2015) проводились дослідження термоелектричних властивостей кристала CuAlTe₂. З'ясовано провідні властивості Cu-вмісного халькопїриту та показано, що сполука CuAlTe₂ є більш перспективною порівняно з CuGaTe₂, що є ефективним термоелектричним матеріалом з конкурентним коефіцієнтом добротності (Gudelli, 2015). Вивченню умов росту та характеристики тонких плівок CuAlTe₂ присвячена робота (Benchouk, 1999). Структура та властивості CuAlTe₂, як буферного шару досліджено в роботі (Benchouk, 2010), а з'ясуванню впливу товщини плівки на структурні, морфологічні властивості плівок CuAlTe₂ – (Hassan, 2020). Першопринципні моделювання за високих температур здійснено в роботі (Sharma, 2014). Про особливості температурного розширення та структурні властивості системи твердих розчинів (CuAlTe₂)_{1-x}(CuAlSe₂)_x повідомляється в роботі (Kozun, 2006). Деякі пружні властивості обговорюються в роботі (Gupta, 2023), а електронна структура сполук CuAlX₂ (X = S, Se, Te) досліджувалась в роботі (Reshak, 2008).

Для практичного використання матеріалу важливим при їхньому дослідженні є з'ясування впливу дії зовнішніх чинників, таких як температура, електричне і магнітне поле, гідростатичний та одновісний тиски. У роботі проводиться теоретичне дослідження сполуки CuAlTe₂ в рамках теорії функціоналу густини за дії гідростатичних тисків. З'ясовується вплив гідростатичного тиску на структурні параметри кристала та його зонно-енергетичну структуру.

Методика розрахунків. У роботі розрахунки проводяться з використанням теорії функціоналу густини (density functional theory – DFT) (Ravindran, 1998). Моделювання здійснюється за допомогою програми CASTEP (Clark, 2005). Обмінно-кореляційні ефекти розглядалися в рамках узагальненого градієнтного наближення (generalized gradient approximation – GGA) з параметризацією у вигляді функціонала Пердью-Бурке-Ернзергофа (Perdew, 1981). Енергію відсікання базисної плоскої хвилі було обрано на рівні 450 еВ, а вибір *k*-сітки за схемою Монкхорста-Пака (Monkhorst, 1976). *k*-сітка була встановлена як 5×5×3 *k*-точок для зони Бріллюена. Вибір *k*-сітки та значення енергії

відсікання E_{cut} здійснювався шляхом проведення тесту збіжності повної енергії кристала. Критерії збіжності були такими: повна енергія 10⁻⁵ еВ/атом, максимальна сила та напруга 0,03 еВ/Å та 0,05 ГПа відповідно, а максимальне зміщення атомів 0,001 Å. При розрахунках використовувались такі електронні конфігурації: 3d¹⁰4s¹ для Cu, 3s²3p¹ для Al та 5s²5p⁴ для Te. Моделювання впливу гідростатичного тиску на структуру і властивості кристала проводилось шляхом геометричної оптимізації кристалічної структури за значень тиску 0-5 ГПа. Для цього використано BFGS метод, що дозволяє знайти рівноважні параметри ґратки та координати атомів (Pfrommer, 1997).

Результати і обговорення. Вихідними даними для проведення розрахунків зонно-енергетичної структури сполуки CuAlTe₂ були експериментально отримані кристалографічні параметри, подані в роботі (Hahn, 1953). Згідно з цією роботою для кристала CuAlTe₂ параметри ґратки є такими: *a* = 5,976 Å, *c* = 11,804 Å, *V* = 421,551 Å³, *Z* = 4, а просторова група *I*-42*d*. Вигляд елементарної комірки кристала зображено на рис. 1.

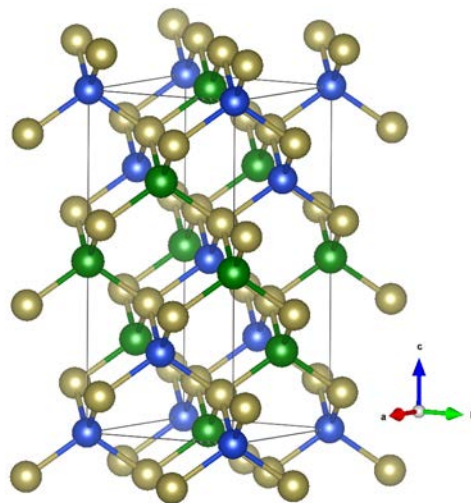


Рис. 1. Кристалічна ґратка кристала CuAlTe₂ у фазі зі структурою халькопїриту: сині кульки – атоми міді; зелені кульки – атоми алюмінію; коричневі кульки – атоми телуру

Кожен атом у структурі має чотирьох найближчі сусіди: кожен іон металу координується чотирма іонами телуру, кожен іон телуру має два найближчих сусіда Al та два Cu. Координати атомів у структурі CuAlTe₂ зібрані в таблиці 1.

Оптимізацію структури кристалічної ґратки досліджуваного матеріалу проводили

в діапазоні тисків від 0 до 5 ГПа з кроком 1 ГПа. Як видно з таблиці, експериментальна та оптимізована структури за відсутності тиску є близькими. Оптимізовані параметри ґратки є такими: $a = 6,11272 \text{ \AA}$, $c = 12,1111 \text{ \AA}$, $V = 452,535 \text{ \AA}^3$. Порівняно з експериментальними даними, оптимізовані параметри ґратки кристала є дещо завищеними (на 2,3% для параметра a , і на 2,6% для параметра c). Таке завищення для оптимізованої кристалічної структури є типовим за використання GGA і може прийматись за передбачуваний недолік цього функціонала (Rudysh, 2022; Rudysh, 2023).

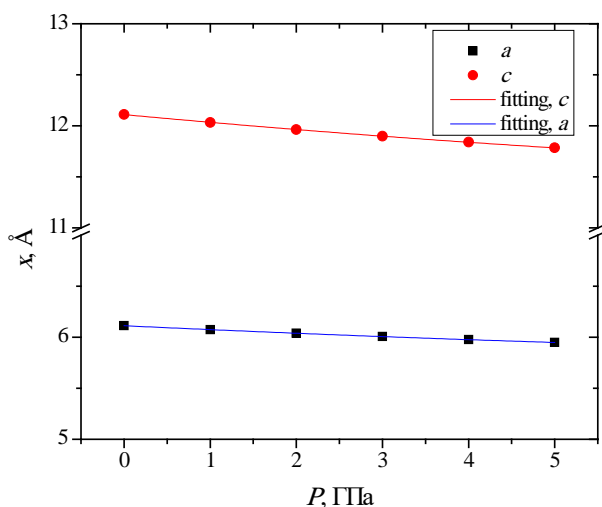


Рис. 2. Параметри кристалічної ґратки кристала CuAlTe_2 за дії гідростатичного тиску в діапазоні 0-5 ГПа

На рис. 2 зображено залежність параметрів кристалічної ґратки кристала CuAlTe_2 від величини прикладеного гідростатичного тиску P . Як видно з рисунка, застосування гідростатичного тиску в діапазоні 0-5 ГПа призводить до монотонного зменшення параметрів ґратки a та c . Розраховані параметри ґратки (позначені точками) апроксимовано функцією типу $x = x_0 + \alpha P + \beta P^2$, де x – параметр ґратки, α та β – параметри апроксимації, P – тиск. В результаті

апроксимації отримано такі рівняння: $a = 6,112 - 0,0396 P + 0,0014 P^2$ – для параметра a та $c = 12,110 - 0,0784 P + 0,026 P^2$ – для параметра c . З рівнянь видно, що параметр ґратки c зазнає дещо більшої зміни ніж параметр a . Як наслідок, зміни параметрів ґратки під дією гідростатичного тиску P відображаються в зміні об'єму кристалічної ґратки V . На рис. 3 зображено баричну залежність об'єму елементарної комірки кристала CuAlTe_2 в діапазоні тисків 0-5 ГПа. Видно, що застосування гідростатичного тиску призводить до дещо нелінійної зміни об'єму ґратки V . Варіації відносної зміни об'єму елементарної комірки V/V_0 (тут V і V_0 є об'ємом елементарної комірки за тиску P і тиску навколишнього середовища) були апроксимовані рівнянням стану Мурнагана (Brik, 2013).

$$V/V_0 = (1 + P(B'/B))^{-1/B'}, \quad (1)$$

де B та $B' = dB/dP$ є об'ємний модуль стиску та його перша похідна по тиску, відповідно. Така апроксимація є простим методом з'ясування величини пружних модулів.

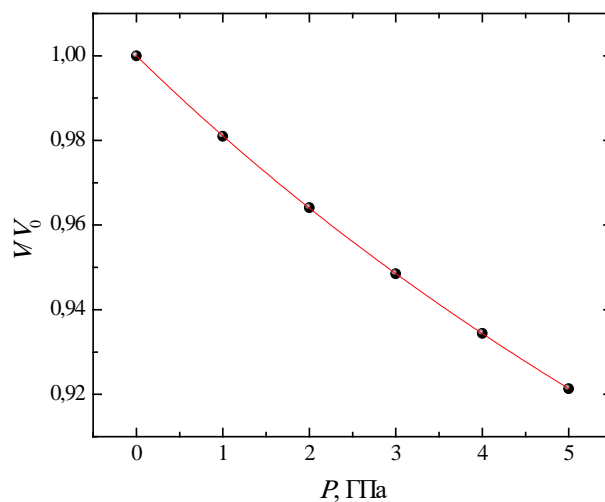


Рис. 3. Розрахована відносна зміна об'єму (зафарбовані круги), апроксимація рівняння стану Мурнагана (червона лінія) для кристала CuAlTe_2

Таблиця 1

Експериментальні (Nahn, 1953) та оптимізовані координати атомів у ґратці кристала CuAlTe_2 за $P = 0$

Атом	Експеримент (Nahn, 1953)			Оптимізація		
	x/a	y/b	z/c	x/a	y/b	z/c
Cu	0	0	0	0	0	0
Al	0	0	0,5	0	0	0,5
Te	0,25	0,25	0,125	0,243	0,25	0,125

Отримані з апроксимації рівнянням стану Мурнагана значення об'ємного модуля стиску і його перша похідна по тиску становить $B = 49,97$ ГПа та $B' = 4,73$, відповідно. У роботі (Gupta, 2023) повідомляється про значення об'ємного модуля пружності B для кристала CuAlTe_2 в межах 42-53 ГПа, що добре узгоджується з отриманим у цій роботі значення. Величина об'ємного модуля пружності є на 29 ГПа меншим за значення модуля для CuGaS_2 та приблизно на 35 ГПа менше за значення отримане для CuAlS_2 ($B = 78,5$ ГПа та $B' = 5,27$) (Brik, 2013). Мала величина об'ємного модуля пружності відповідає відносно м'якому матеріалу щодо дії гідростатичного тиску.

Оскільки матеріали даної групи володіють тетраедричною деформацією кристалічної ґратки, нами розраховано залежність параметра тетраедричної деформації η від прикладеного тиску P . Вона виникає внаслідок нееквівалентності хімічних зв'язків у структурі кристала. Цей параметр визначається як

$$\eta = c/2a. \quad (2)$$

Для ідеальної структури кристала значення параметра η рівне 1, тоді як відхилення від цього значення вказує на ступінь її деформації. З рисунка видно, що гідростатичний тиск призводить до зменшення значення коефіцієнта деформації η , що вказує на зростання структурної анізотропії досліджуваної сполуки. Це свідчить про пониження симетрії кристала, що ймовірно збільшить анізотропію його властивостей.

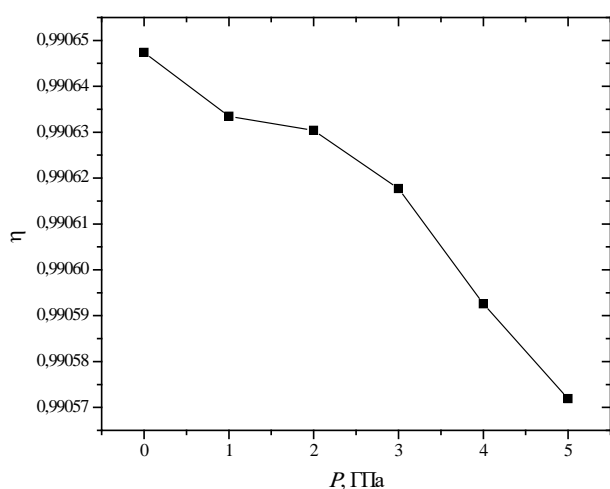


Рис. 4. Залежність параметра тетраедричної деформації η від гідростатичного тиску

Розрахована зонно-енергетична структура кристала CuAlTe_2 з використанням GGA-PBE функціонала зображено на рисунку 5 (а). Видно, що у досліджуваної сполуки ширина забороненої зони, як і в інших представників групи I-III-VI₂, є прямого типу (Rudysh, 2022; Rudysh, 2023). Вершина валентної зони та дно зони провідності розташовані у центрі зони Бріллюена (Г-точка). За відсутності гідростатичного тиску значення $E_g = 1,006$ еВ. Отримане значення є заниженим на величину приблизно 1,05 еВ порівняно з наявними експериментальними даними для досліджуваної сполуки (Reddy, 1995). Така недооцінка є типовою для GGA функціонала, однак відносна зміна фізичних величин за використання цього функціоналу може бути оцінена з доброю точністю. Застосування гідростатичного тиску не призводить до зміни типу забороненої зони (рис. 5б). Спостерігається незначна деформація зонної структури що головню виражається в зміні ширини забороненої зони та незначній деформації деяких рівнів. Зі збільшенням тиску від 0 до 5 ГПа значення E_g зростає до 1,426 еВ, що становить на приблизно 0,47%. Ці результати можна пояснити скороченням відстані між атомами при стисненні, що призводить до зміни потенціалів взаємодії.

З розрахунку зонно-енергетичної структури кристала CuAlTe_2 для різних тисків побудовано баричну залежність значення ширини забороненої зони (рис. 6). Щоб визначити коефіцієнт баричної зміни E_g , значення прямої забороненої зони апроксимовано квадратичною функцією: $E_g(P) = E_g(0) + aP + bP^2$. Отримані параметри апроксимації є такими: $E_g = 1,00418$ еВ, $a = 0,108$ еВ/ГПа, $b = -0,00473$ еВ/(ГПа)². З рівняння видно, що зміна ширини забороненої зони за дії гідростатичного тиску є близькою до лінійної з незначною параболічністю. У досліджуваного матеріалу CuAlTe_2 зміна E_g з тиском є швидшою порівняно з кристалом CuAlS_2 (Geng, 2023). Це вказує на більшу чутливість властивостей кристала CuAlTe_2 до дії гідростатичного тиску.

Висновки. У роботі проведено вивчення впливу гідростатичного тиску на зонно-енергетичну структуру кристала CuAlTe_2 в рамках теорії функціоналу густини. Отримані під час процедури геометричної оптимізації параметри ґратки добре узгоджується

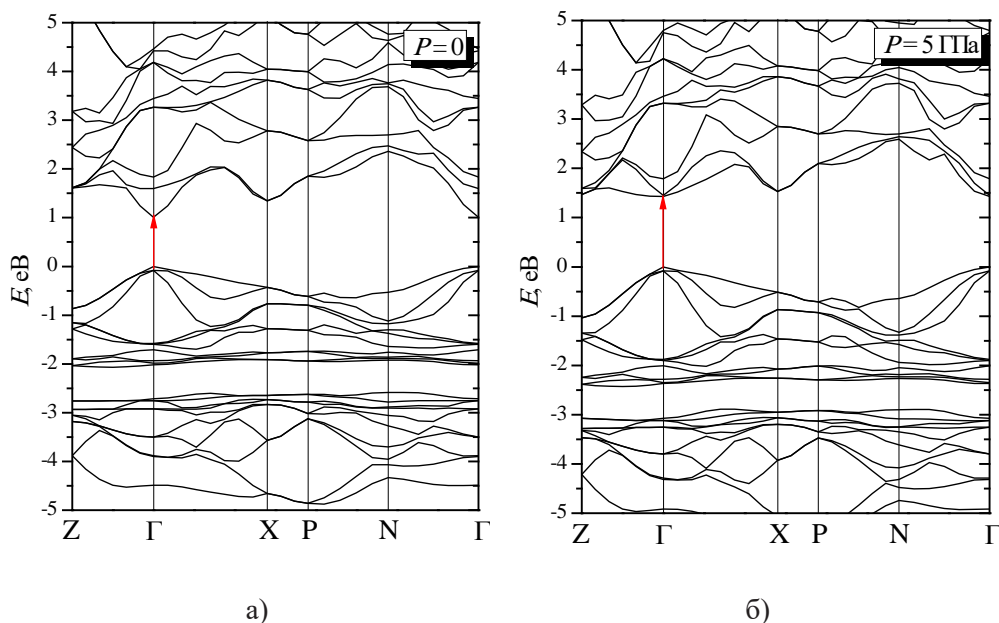


Рис. 5. Зонно-енергетична структура кристала CuAlTe_2 отримана для різних значень гідростатичного тиску: а) $P = 0$, б) $P = 5$ ГПа

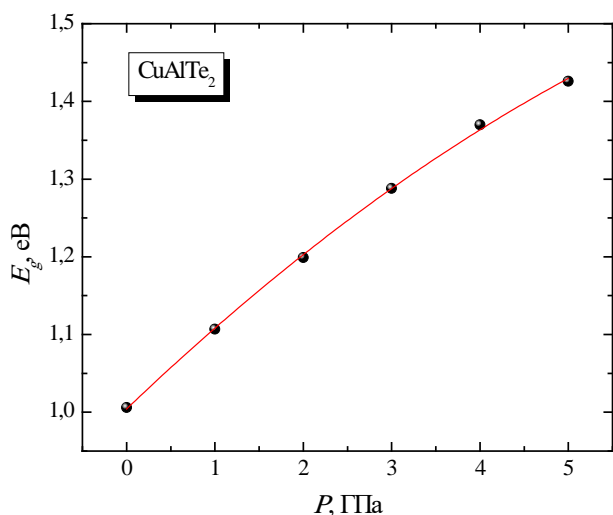


Рис. 6. Барична залежність прямої забороненої зони для кристала CuAlTe_2 в діапазоні гідростатичних тисків 0-5 ГПа

з експериментальними даними X-променеви́х досліджень поданих в літературі. Розраховані параметри є дещо завищеними (на 2,3 % для параметра a та на 2,6 % для параметра c). Застосування гідростатичного тиску призводить до майже лінійної зміни параметрів ґратки

з незначною параболічністю, що може бути описане рівнянням $a = 6,112 - 0,0396 P + 0,0014 P^2$ – для параметра a та $c = 12,110 - 0,0784 P + 0,026 P^2$ – для параметра c .

З відносної зміни об'єму V/V_0 , отримано об'ємний модуль стиску B та його першу похідну по тиску B' , що становлять 49,97 ГПа та 4,73, відповідно. Показано що кристалу CuAlTe_2 є відносно м'яким матеріалом щодо гідростатичного стискання. З'ясовано, що з тиском тетраедрична деформація кристала зростає, що вказує на зростання анізотропії матеріалу в цілому.

Електронна структура кристала CuAlTe_2 є подібною до отриманої для інших матеріалів групи халькопіриту, для яких вершина валентної зони та дно зони провідності знаходиться в центрі зони Брілюєна. З'ясовано, що застосування гідростатичного тиску зумовлює зростання ширини забороненої зони кристала CuAlTe_2 . Барична залежність E_g описується рівнянням $E_g(P) = 1,00418 + 0,108P - 0,00473P^2$. Така поведінка E_g зумовлена скороченням відстані між атомами при стисненні, що призводить до зміни потенціалів взаємодії.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Honeyman W.N., Wilkinson K.H., Growth and properties of single crystals of group I-III-VI₂ ternary semiconductors, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1971, 4. P. 1182–1185.
2. Koschel W.H., Sorger F., Baars J., Optical phonons in I-III-VI₂ compounds, *J. Phys. Colloques.* 1975. 36. P. C3-177-C3-181.

3. Matsushita H., Endo S.E.S., Irie T.I.T., Raman-scattering properties of I-III-VI₂ group chalcopyrite semiconductors, *Jpn. J. Appl. Phys.* 1992. 31. P. 18.
4. Benseddik N., Belkacemi B., Boukabrine F., Ameer K., Mazari H., Boumesjed A., Benyahya N., Benamara Z., Numerical study of AgInTe₂ solar cells using SCAPS, *Advances in Materials and Processing Technologies*. 2020. P. 1–9.
5. Kowsar A., Hosen M.B., Ali M.K., Asaduzzaman M., Bahar A.N., Performance optimization of ZnS/CIGS solar cell with over 25% efficiency enabled by using a CuIn₃Se₅ OVC layer, *International Journal of Renewable Energy Research (IJRER)*. 2020. 10. P. 2000–2005.
6. Mondal G., Santra A., Jana S., Pramanik N., Mondal A., Bera P., Enhanced photocatalytic activity of ternary CuInS₂ nanocrystals synthesized from the combination of a binary Cu(I)S precursor and InCl₃, *Journal of Nanoparticle Research*. 2018. 20. P. 108.
7. Regulacio M.D, Han M.-Y., Multinary I-III-VI₂ and I₂-II-IV-VI₄ semiconductor nanostructures for photocatalytic applications, *ACS Publications*. 2016. 49. P. 511–519.
8. Huang D., Ding L., Xue Y., Guo J., Zhao Y.-J., Persson C., Interface of Sn-doped AgAlTe₂ and LiInTe₂: A theoretical model of tandem intermediate band absorber, *Appl. Phys. Lett.* 2021. 118. P. 043901.
9. Boyd G., Kasper H., McFee J., Linear and nonlinear optical properties of AgGaS₂, CuGaS₂, and CuInS₂, and theory of the wedge technique for the measurement of nonlinear coefficients, *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 1971. 7. P. 563–573.
10. Rudysh M.Ya., Electronic structure, optical and elastic properties of AgAlS₂ crystal under hydrostatic pressure, *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2022. 148. P. 106814.
11. Rudysh M.Ya., Shchepanskyi P.A., Fedorchuk A.O., Brik M.G., Stadnyk V.Yo., Myronchuk G.L., Kotomin E.A., Piasecki M., Impact of anionic system modification on the desired properties for CuGa(S_{1-x}Se_x)₂ solid solutions, *Computational Materials Science*. 2021. 196. P. 110553.
12. Rudysh M.Ya., Piasecki M., Myronchuk G.L., Shchepanskyi P.A., Stadnyk V.Yo., Onufriv O.R., Brik M.G., AgGaTe₂ – The thermoelectric and solar cell material: Structure, electronic, optical, elastic and vibrational features, *Infrared Physics & Technology*. 2020. 111. P. 103476.
13. Bovornratanaraks T., Kotmool K., Yoodee K., McMahon M.I., Ruffolo D., High pressure structural studies of AgInTe₂, *J. Phys.: Conf. Ser.* 2010. 215. P. 012008.
14. Gudelli V.K., Kanchana V., Vaitheeswaran G., CuAlTe₂: A promising bulk thermoelectric material, *Journal of Alloys and Compounds*. 2015. 648. P. 958–965.
15. Benchouk K., El Moctar C., Bernede J.C., Marsillac S., Pouzet J., Barreau N., Emziane M., Growth and physicochemical characterization of CuAlTe₂ films obtained by reaction, induced by annealing, between Cu/Al/Te/Al/Cu... Al/Cu/Al/Te layers sequentially deposited, *Journal of Materials Science*. 1999. 34. P. 1847–1853.
16. Benchouk K., Zamallach K., Khelil A., Bernede J.C., Structural properties of ternary buffer films based upon CuAlTe₂, *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 2010. 13. P. 012024.
17. Hassan N.A., Khudayer I.H., Thickness effect of CuAlTe₂ thin films on morphological, structural and visual properties, *Ibn AL-Haitham Journal For Pure and Applied Sciences*. 2020. 33. P. 27–43.
18. Sharma M., Singh P., Kumari M., Verma U.P., CuAlTe₂ under high temperature: An ab initio approach, *AIP Conf. Proc.* 2014. 1591. P. 1321–1323.
19. Korzun B.V., Fadzeyeva A.A., Bente K., Schmitz W., Schorr S., Thermal expansion and structural properties of (CuAlTe₂)_{1-x}(CuAlSe₂)_x solid solutions, *Crystal Research and Technology*. 2006. 41. P. 168–173.
20. Gupta R.C., Varshney P., Mechanical stability parameters of chalcogenides and pnictides based optoelectronic materials, *Chalcogenide Letters*. 2023. 20. P. 101–112.
21. Reshak A.H., Auluck S., Electronic properties of chalcopyrite CuAlX₂ (X = S, Se, Te) compounds, *Solid State Communications*. 2008. 145. P. 571–576.
22. Ravindran P., Fast L., Korzhavyi P. A., Johansson B., Wills J., Eriksson O., Density functional theory for calculation of elastic properties of orthorhombic crystals: Application to TiSi₂, *Journal of Applied Physics*. 1998. 84. P. 4891–4904.
23. Clark S.J., Segall M.D., Pickard C.J., Hasnip P.J., Probert M.I.J., Refson K., Payne M.C., First principles methods using CASTEP, *Zeitschrift Für Kristallographie - Crystalline Materials*. 2005. 220. P. 567–570.
24. Perdew J.P., Zunger A., Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Phys. Rev. B*. 1981. 23. P. 5048–5079.
25. Monkhorst H.J., Pack J.D., Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B*. 1976. 13. P. 5188–5192.
26. Frommer B.G., Côté M., Louie S.G., Cohen M.L., Relaxation of crystals with the quasi-Newton method, *Journal of Computational Physics*. 1997. 131. P. 233–240.
27. Hahn H., Frank G., Klingler W., Meyer A.-D., Störger G., Untersuchungen über ternäre Chalkogenide. V. Über einige ternäre Chalkogenide mit Chalkopyritstruktur, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*. 1953. 271. P. 153–170.

28. Rudysh M.Ya., Electronic structure, optical and elastic properties of AgAlS₂ crystal under hydrostatic pressure, *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2022. 148. P. 106814.
29. Rudysh M.Ya., Shchepanskyi P.A., Myronchuk G.L., Piasecki M., Martyniuk O.S., Vibrational, thermodynamic and acoustic properties of AgAlS₂ crystal, *Physica B: Condensed Matter*. 2023. 654. P. 414731.
30. Brik M.G., Ma C.G., Tailoring the electronic and elastic properties by varying the composition of the CuGa_{1-x}Al_xS₂ chalcopyrite semiconductor, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2013. 46. P. 285304.
31. Reddy R.R., Ahammed Y.N., A study on the Moss relation, *Infrared Physics & Technology*. 1995. 36. P. 825–830.
32. Geng J., Wu J., Effects of pressure on structural, mechanical, and electronic properties of chalcopyrite compound CuAlS₂, *Cchalcogenide Letters*. 2023. 20. P. 215–225.

REFERENCES:

- Honeyman, W.N., & Wilkinson, K.H. (1971). Growth and properties of single crystals of group I-III-VI₂ ternary semiconductors, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 4. P. 1182–1185.
- Koschel, W.H., Sorger, F., & Baars, J. (1975). Optical phonons in I-III-VI₂ compounds, *J. Phys. Colloques*. 36. P. C3-177-C3-181.
- Matsushita, H., Endo, S.E.S., & Irie, T.I.T. (1992). Raman-scattering properties of I-III-VI₂ group chalcopyrite semiconductors, *Jpn. J. Appl. Phys.* 31. P. 18.
- Benseddik, N., Belkacemi, B., Boukabrane, F., Ameer, K., Mazari, H., Boumesjed, A., Benyahya, N., & Benamara, Z. (2020). Numerical study of AgInTe₂ solar cells using SCAPS, *Advances in Materials and Processing Technologies*. P. 1–9.
- Kowsar, A., Hosen, M.B., Ali, M.K., Asaduzzaman, M., & Bahar, A.N. (2020). Performance optimization of ZnS/CIGS solar cell with over 25% efficiency enabled by using a CuIn₃Se₅ OVC layer, *International Journal of Renewable Energy Research (IJRER)*. 10. P. 2000–2005.
- Mondal, G., Santra, A., Jana, S., Pramanik, N., Mondal, A., & Bera, P. (2018). Enhanced photocatalytic activity of ternary CuInS₂ nanocrystals synthesized from the combination of a binary Cu(I)S precursor and InCl₃, *Journal of Nanoparticle Research*. 20. P. 108.
- Regulacio, M.D., & Han, M.-Y. (2016). Multinary I-III-VI₂ and I₂-II-IV-VI₄ semiconductor nanostructures for photocatalytic applications, *ACS Publications*. 49. P. 511–519.
- Huang, D., Ding, L., Xue, Y., Guo, J., Zhao, Y.-J., & Persson, C. (2021). Interface of Sn-doped AgAlTe₂ and LiInTe₂: A theoretical model of tandem intermediate band absorber, *Appl. Phys. Lett.* 118. P. 043901.
- Boyd, G., Kasper, H., & McFee, J. (1971). Linear and nonlinear optical properties of AgGaS₂, CuGaS₂, and CuInS₂, and theory of the wedge technique for the measurement of nonlinear coefficients, *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 7. P. 563–573.
- Rudysh, M.Ya. (2022). Electronic structure, optical and elastic properties of AgAlS₂ crystal under hydrostatic pressure, *Materials Science in Semiconductor Processing*. 148. P. 106814.
- Rudysh, M.Ya., Shchepanskyi, P.A., Fedorchuk, A.O., Brik, M.G., Stadnyk, V.Yo., Myronchuk, G.L., Kotomin, E.A., & Piasecki, M. (2021). Impact of anionic system modification on the desired properties for CuGa(S_{1-x}Se_x)₂ solid solutions, *Computational Materials Science*. 196. P. 110553.
- Rudysh, M.Ya., Piasecki, M., Myronchuk, G.L., Shchepanskyi, P.A., Stadnyk, V.Yo., Onufriv, O.R., & Brik, M.G. (2020). AgGaTe₂ – The thermoelectric and solar cell material: Structure, electronic, optical, elastic and vibrational features, *Infrared Physics & Technology*. 111. P. 103476.
- Bovornratanaraks, T., Kotmool, K., Yoodee, K., McMahon, M.I., & Ruffolo, D. (2010). High pressure structural studies of AgInTe₂, *J. Phys.: Conf. Ser.* 215. P. 012008.
- Gudelli, V.K., Kanchana, V., & Vaitheeswaran, G. (2015). CuAlTe₂: A promising bulk thermoelectric material, *Journal of Alloys and Compounds*. 648. P. 958–965.
- Benchouk, K., El Moctar, C., Bernede, J.C., Marsillac, S., Pouzet, J., Barreau, N., Emziane, M. (1999). Growth and physicochemical characterization of CuAlTe₂ films obtained by reaction, induced by annealing, between Cu/Al/Te/Al/Cu... Al/Cu/Al/Te layers sequentially deposited, *Journal of Materials Science*. 34. P. 1847–1853.
- Benchouk, K., Zamallah, K., Khelil, A., & Bernede, J.C. (2010). Structural properties of ternary buffer films based upon CuAlTe₂, *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 13. P. 012024.
- Hassan, N.A., & Khudayer, I.H. (2020). Thickness effect of CuAlTe₂ thin films on morphological, structural and visual properties, *Ibn AL-Haitham Journal For Pure and Applied Sciences*. 33. P. 27–43.
- Sharma, M., Singh, P., Kumari M., & Verma, U.P. (2014). CuAlTe₂ under high temperature: An ab initio approach, *AIP Conf. Proc.* 1591. P. 1321–1323.
- Korzun, B.V., Fadzeyeva, A.A., Bente, K., Schmitz, W., & Schorr, S. (2006). Thermal expansion and structural properties of (CuAlTe₂)_{1-x}(CuAlSe₂)_x solid solutions, *Crystal Research and Technology*. 41. P. 168–173.

20. Gupta, R.C., & Varshney, P. (2023). Mechanical stability parameters of chalcogenides and pnictides based optoelectronic materials, *Chalcogenide Letters*. 20. P. 101–112.
21. Reshak, A.H., & Auluck, S. (2008). Electronic properties of chalcopyrite CuAlX_2 ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) compounds, *Solid State Communications*. 145. P. 571–576.
22. Ravindran, P., Fast, L., Korzhavyi, P. A., Johansson, B., Wills, J., & Eriksson, O. (1998). Density functional theory for calculation of elastic properties of orthorhombic crystals: Application to TiSi_2 , *Journal of Applied Physics*. 84. P. 4891–4904.
23. Clark, S.J., Segall, M.D., Pickard, C.J., Hasnip, P.J., Probert, M.I.J., Refson, K., & Payne M.C. (2005). First principles methods using CASTEP, *Zeitschrift Für Kristallographie - Crystalline Materials*. 220. P. 567–570.
24. Perdew, J.P., & Zunger, A. (1981). Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Phys. Rev. B*. 23. P. 5048–5079.
25. Monkhorst, H.J., & Pack, J.D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B*. 13. P. 5188–5192.
26. Pfrommer, B.G., Côté, M., Louie, S.G., & Cohen, M.L. (1997). Relaxation of crystals with the quasi-Newton method, *Journal of Computational Physics*. 131. P. 233–240.
27. Hahn, H., Frank, G., Klingler, W., Meyer, A.-D., & Störger, G. (1953). Untersuchungen über ternäre Chalkogenide. V. Über einige ternäre Chalkogenide mit Chalkopyritstruktur, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*. 271. P. 153–170.
28. Rudysh, M.Ya. (2022). Electronic structure, optical and elastic properties of AgAlS_2 crystal under hydrostatic pressure, *Materials Science in Semiconductor Processing*. 148. P. 106814.
29. Rudysh, M.Ya., Shchepanskyi, P.A., Myronchuk, G.L., Piasecki, M., & Martyniuk, O.S. (2023). Vibrational, thermodynamic and acoustic properties of AgAlS_2 crystal, *Physica B: Condensed Matter*. 654. P. 414731.
30. Brik, M.G., & Ma, C.G. (2013). Tailoring the electronic and elastic properties by varying the composition of the $\text{CuGa}_{1-x}\text{Al}_x\text{S}_2$ chalcopyrite semiconductor, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 46. P. 285304.
31. Reddy, R.R., & Ahammed, Y.N. (1995). A study on the Moss relation, *Infrared Physics & Technology*. 36. P. 825–830.
32. Geng, J., & Wu, J. (2023). Effects of pressure on structural, mechanical, and electronic properties of chalcopyrite compound CuAlS_2 , *Chalcogenide Letters*. 20. P. 215–225