

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

ФЕЕ :: 2017

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 17–21 квітня 2017 року)



Суми
Сумський державний університет
2017

Ab initio розрахунки електронної структури твердих розчинів заміщення $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$

Кашуба А.І., аспірант; Бовгира О.В., доцент; Франів А.В., професор;
Львівський національний університет імені Івана Франка,
м. Львів

В даній роботі представляються теоретичні дослідження властивостей електронного спектру твердих розчинів заміщення (ТРЗ) $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$, які кристалізуються у шаруватій орторомбічній структурі з просторовою групою симетрії D_{2h}^{17} (Стст).

Для визначення зонної структури ТРЗ $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$ з перших принципів використано метод нелокального псевдопотенціалу, що зберігає норму. Розрахунки повної енергії кристалів проводились нами самоузгоджено в межах теорії функціонала густини (DFT), а електронні енергії та густини визначено з рівнянь Кона–Шема [1]. Для опису обмінно-кореляційного потенціалу було використано метод узагальненої градієнтної апроксимації (GGA). Представлення цього потенціалу наведені у вигляді Пердью–Бурке–Ернзергофа (PBE) [2].

Для розрахунків використовувались надгратки $2 \times 1 \times 1$, побудовані на основі елементарної комірки InI . Розглядається ряд кристалів з концентраційним внеском талієвої компоненти: 0,125; 0,25; 0,375; 0,5; 0,625. Розрахунки проводились на основі експериментально одержаних параметрах елементарної комірки [3].

Отримано зонно-енергетичні діаграми та розподіл густини електронних станів ТРЗ $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$. Теоретично одержані значення ширина забороненої зони $E_g(x)$ добре узгоджуються із експериментальними даними. Аналіз парціальних внесків окремих орбіталей у функцію повної щільності станів та парціальних внесків окремих зон в електронну густину дозволив визначити генезис валентних зон ТРЗ $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$.

1. P. Hohenberg, *Phys. Rev.* **136**, 864 (1964).
2. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
3. А.І. Кашуба, С.В. Апунович, *Ж. нано-електрон. фіз.* **8**, 01010(5) (2016).