

ЗОННАЯ СТРУКТУРА НАНОПЛЕНОК ХАЛЬКОГЕНИДОВ СВИНЦА

Г.Р. Акманова¹, Н.Н. Биккулова², Д.И. Сафаргалиев², Н.В. Ермилов²

¹Уфимский университет науки и технологий Уфа

²Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий Стерлитамак
grakmanova@mail.ru

Аннотация

Данная работа посвящена расчету зонной структуры нанопленок халькогенидов свинца. Модельные компьютерные расчеты этих соединений были проведены с помощью программного пакета Quantum Espresso [1]. При расчете были использованы ультрамягкие псевдопотенциалы для меди, для халькогенов – псевдопотенциалы сохраняющие норму, которые сгенерированы данной программой. Энергия обрезки плоских волн имела величину 85- 100 Ry. При расчетах учитываются d-, s-электроны для катионов и s-, p-электроны для анионов. Использовался автоматический выбор точек обратной решетки (k-точек) при помощи метода Монкхорста–Пака на сетке 8x8x8.

Введение

Разработка новых видов термоэлектрических материалов для прямого преобразования отработанного тепла в электрическую энергию является актуальной задачей. Соединения халькогенидов свинца считаются перспективным функциональным материалом для электронных устройств, обладают широким спектром физических свойств, таких как термо - эдс. Халькогениды свинца являются узкозонными полупроводниками, ширина запрещенной зоны которых составляет для сульфида свинца PbS 0,39 эВ, для селенида свинца PbSe - 0,27 эВ и теллурида свинца PbTe - 0,32 эВ (Рис. 1). Значительную роль играет степень отклонения от стехиометрии: при избытке атомов свинца кристаллы халькогенидов свинца имеют n-тип проводимости, при избытке халькогена – p-тип проводимости. В спектральном диапазоне 2.5 мкм могут быть созданы эффективные приборы на основе наноструктурированных поликристаллических слоев бинарных соединений и твердых растворов на их основе. Данные приборы обладают высоким быстродействием, небольшими габаритно-весовыми параметрами и малым энергопотреблением, а также работают в неохлаждаемом режиме.

Актуальность

Актуальность проблемы исследования наноматериалов определяется особенностями их физико-химических свойств, позволяющими создавать материалы с качественно и количественно новыми характеристиками. Это связано с тем, что для материала таких малых размеров (по сравнению с обычными) существенным образом изменяются следующие фундаментальные характеристики: теплопроводность, электропроводность, коэффициент диффузии.

Поэтому наноструктурное состояние твердых тел принципиально отличается от обычного кристаллического.

Получение наноматериалов является сложной технической задачей и разработка технологии синтеза и исследование их свойств является важной задачей. Изучение теоретически смоделированных свойств в сравнении с экспериментально полученными наноматериалами на основе халькогенидов свинца, легированных серебром и медью, позволит расширить представления о принципах формирования кристаллической структуры, электрофизических свойств и термо-эдс в этих соединениях.

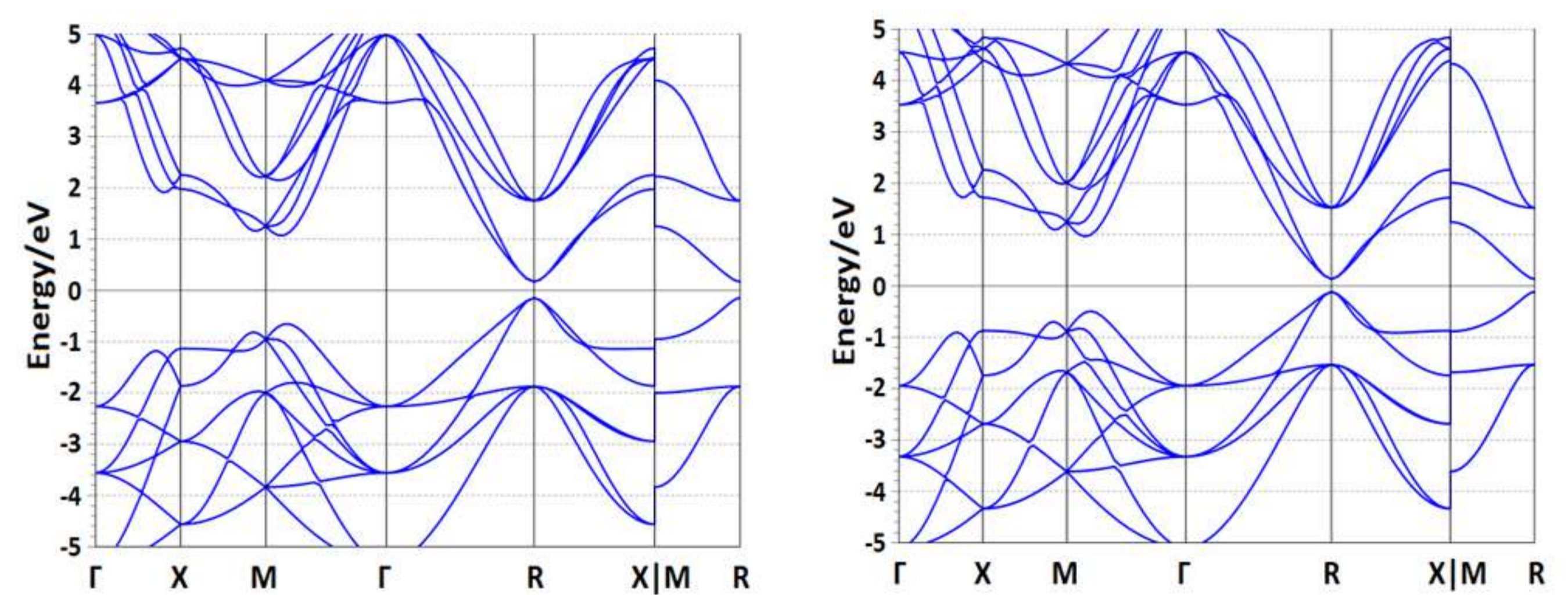


Рис.1. Зонная структура PbS, PbSe

Результаты

В результате исследования нанопленок халькогенидов свинца будут найдены оптимальные условия их синтеза, что даст возможность оценить потенциальные возможности этих соединений в качестве материалов для преобразования тепловой энергии в электрическую. И будут получены новые данные о влиянии упорядочения на электрофизические свойства, что даст возможность более глубоко понять связь между структурными изменениями и поведением свойств таких соединений.

Литература

1. Quantum-ESPRESSO [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.quantum-espresso.org>