

НАСТРОЙКА МОДЕЛИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЧЕРНОГО ФОСФОРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ

аспирант каф. МНЭ, Скачкова В. А.

магистрант каф. МНЭ, Зеленина М. С.

Научный руководитель – канд. техн. наук, Стемпицкий В. Р.

Белорусский государственный университет

информатики и радиоэлектроники,

Минск, Беларусь

Черный фосфор представляет собой слоистый материал, наиболее стабильный аллотроп фосфора, по сравнению с белым и красным фосфором. При низкой температуре он является собственным полупроводником с р-типом проводимости и шириной запрещенной зоны равной $\sim 0,33$ эВ.

Перспективность использования черного фосфора заключается в том, что из его слоистой структуры могут быть получены двумерные слои фосфора (фосфорена), обладающие высокой подвижностью носителей заряда. Кроме того, ширина запрещенной зоны слоистой структуры на основе фосфора может варьироваться от 0,3 эВ до 2 эВ в зависимости от количества слоев. Этот диапазон энергий делает черный фосфор перспективным материалом для применения в качестве структурных элементов полевых транзисторов, в тонкопленочной электронике, устройствах инфракрасной оптоэлектроники.

Для детального теоретического исследования свойств черного фосфора, таких как природы связей между слоями, подвижности носителей заряда в слоистых структурах, оптических свойств данного материала, крайне важен выбор адекватной модели для проведения дальнейших исследований.

Черный фосфор имеет базоцентрированную орторомбическую ячейку с параметрами кристаллической решетки $a = 3,314$ Å, $b = 10,478$ Å, $c = 4,376$ Å (пространственная группа $Cmca$). Элементарная ячейка содержит 8 атомов, каждый из которых ковалентно связан с тремя соседними атомами в слое. Слои связаны между собой силами ванн дер Ваальса.

Для моделирования свойств черного фосфора использовался программный комплекс VASP (*Vienna Ab initio Simulation Package*), предназначенный для проведения квантово-механических расчетов фундаментальных физических и оптических свойств материалов [1]. Для настройки модели проводилось моделирование с использованием различных подходов учета обменно-корреляционного потенциала. Был выбран *optB88-vdW* обменно-корреляционный функционал, который учитывает силы ван дер Ваальса.

Для разбиения на подпространства для гексагональной решетки применялась Gamma схема (генерация сетки k -точек с началом в Γ -точке). Подобрана расчетная сетка $8 \times 3 \times 6$ k -точек, выбранная исходя из оптимальных энергии системы и временных затрат машинного времени. На рис. 1 изображен график зависимости энергии системы от энергии обрезания. Видно, что энергия системы достигает насыщения при $E_{cut} = 350$ эВ. Таким образом, это значение будет использоваться для дальнейших исследований.

В результате работы выполнена настройка модели черного фосфора и выбраны оптимальные входные данные для дальнейших исследований свойств слоистого черного фосфора.

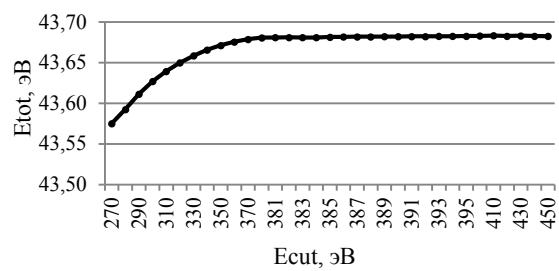


Рис. 1. Зависимость полной расчетной энергии системы от заданной энергии обрезания E_{cut} .

Литература

1. Kresse, G. VASP the guide: tutorial / Austria, University of Vienna. – 2003. – P. 94 – 104.