**Компьютерное моделирование энергетических зон и оптических параметров дихалькогенидов олова**

**Шапошников В.Л.**

**Кривошеева А.В.**

**Борисенко В.Е.**

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

**Аннотация.** Методами квантово-механического моделирования установлены зонная структура и оптические свойства объема и одного мономолекулярного слоя дихалькогенидов олова – SnS2, SnSe2 и SnTe2. Показано, что первые два соединения в объеме являются непрямозонными полупроводниками, в то время как SnTe2 – бесщелевой полупроводник. При увеличении порядкового номера атома халькогена рассмотренные соединения демонстрируют увеличение постоянных решетки и межатомного расстояния, а также уменьшение ширины запрещенной зоны с 2,4 до 0 эВ. При переходе от объемного материала к одному мономолекулярному слою структурные параметры практически не изменяются; наблюдается пропорциональный рост величины энергетического зазора, в результате чего SnTe2 становится узкозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 0,17 эВ. Из исследованных соединений наиболее интересным с точки зрения практического использования является диселенид олова SnSe2 благодаря подходящей для применения в фотовольтаике ширине запрещенной зоны (1,0–1,5 эВ) и значениям коэффициента поглощения вблизи края собственного поглощения более 105 см–1. Также большой интерес представляют тройные растворы замещения, варьирование химическим составом которых позволяет изменять в широком диапазоне электронную структуру и оптические свойства материалов.

Ключевые слова: дихалькогениды олова, зонная структура, ширина запрещенной зоны, коэффициент оптического поглощения, солнечный элемент.