

## МЕТОД ОБОБЩЕННОГО ГРАДИЕНТНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ В ФОРМЕ PBE ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

*Шведун А.В., Маркусенко Н.С.*

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
г. Минск, Республика Беларусь*

*Научный руководитель: Яцук В.А. – магистр, ассистент кафедры ПИКС*

**Аннотация.** Обзор методики применения функционала *PBE* для определения толщины запрещенной зоны полупроводников. Рассмотрены важные аспекты, связанные с расчетами электронной структуры и теорией функционала плотности.

**Ключевые слова.** Запрещенная зона, полупроводники, теория функционала плотности, приближение локальной плотности, обобщенный градиент приближения, функционал Пердью-Берк-Эрнцерхофа

**Введение.** Определение основного состояния электронов в молекулах – цель расчетов электронной структуры. Если определить методику расчетов для любой конфигурации ядер, то определение основных свойств молекулы будет тривиальной задачей. На основе простых моделей можно построить точные эмпирические модели для различных свойств, в том числе и ширины запрещенной зоны – основного параметра, определяющего электрические свойства полупроводников.

**Основная часть.** Опираясь на теорию DFT, свойства многоэлектронной системы можно определить с помощью функционалов, то есть функций от другой функции. Функционалы классифицируются в соответствии с «лестницей Якова-Пердью», основой которой являются разные уровни приближения функционалов. Например, более высокий уровень должен восстанавливать результаты более низких ступеней, а также добавлять функциональные возможности [1]. Функционалы бывают разных видов: неэмпирические, эмпирические и сверхэмпирические. Нас интересуют только неэмпирические функционалы, к которым относятся приближение локальной плотности (LDA) и обобщенный градиент приближения (GGA). Неэмпирические расчеты DFT позволяют прогнозировать поведение частиц на основе квантовых-механических соображений, не требуя параметров более высокого порядка, таких как фундаментальные свойства материала [1].

Одно из основных предположений LDA о том, что плотность в точке рассмотрения везде одинакова, является существенным недостатком данного функционала. Поскольку в этом случае недооценивается обменная энергия и переоценивается корреляционная энергия. Однако ошибки из-за частей обмена и корреляции имеют тенденцию в определенной степени компенсировать друг друга. Данного недостатка лишен обобщенный градиент приближения, поскольку он учитывает градиент плотности в точке рассмотрения.

На любом заданном уровне приближения должно быть наиболее общим. Наиболее универсальным GGA является функционал Пердью-Берк-Эрнцерхофа (PBE), поскольку он применяется как к молекулам, так и к твердым частицам, включая металлы [2].

Метод градиентного приближения в форме PBE широко применяется в различных областях науки и технологии, таких как [3]:

1 Исследование электронных свойств материалов. Данный функционал используется для расчета электронных структур и связанных с ними свойств различных материалов. Также с его помощью можно оценить энергетические уровни, ширину запрещенной зоны, диэлектрические свойства и другие параметры.

2 Оптимизация материалов. Основываясь на данном методе, можно получать необходимые материалы с заранее выбранными свойствами. Это может включать поиск

новых полупроводников с определенной шириной запрещенной зоны, катализаторов с высокой активностью или материалов для хранения энергии.

3 Исследование поверхностных явлений. Поскольку метод также применяется для поверхностей, то есть возможность использовать его для исследования поверхностных явлений, таких как адсорбция, диффузия и рекомбинация на поверхности материалов. Полученные данные в дальнейшем могут использоваться для анализа роста пленок и других процессов, происходящих на границе раздела.

Методика применения функционала Пердю-Берк-Эрнцерхофа для определения толщины запрещенной зоны полупроводников включает в себя следующие шаги [2]:

1 Требуется подготовить модель кристаллической структуры полупроводника, выбранного для исследования. Для этого необходимо подобрать свойства кристаллической решетки такие как: тип, состав, структуру, длины решетки и углы между ее векторами.

2 Провести расчет электронной структуры полупроводника с помощью программного обеспечения, поддерживающего DFT: VASP, Quantum ESPRESSO, GPAW. Для выполнения расчета также необходимо ввести его параметры и критерии сходимости. По завершению данного этапа, определяются энергетические уровни электронов внутри материала.

3 После расчета электронной структуры анализируются энергетические уровни электронов в зоне проводимости и валентной зоне. Разница между наименьшей энергией зоны проводимости и наибольшей энергией зоны валентности равняется ширине запрещенной зоны.

4 Анализ полученных данных. Заключается в анализе полученных результатов, принимая во внимание особенности структуры проводника и влияние различных факторов.

Использование функционала PBE для определения ширины запрещенной зоны полупроводников позволяет получить качественные результаты, которые согласуются с экспериментальными данными.

**Заключение.** Рассмотрены важные аспекты, связанные с расчетами электронной структуры и теорией функционала плотности. Описаны ключевые этапы расчета ширины запрещенной зоны в полупроводниковых материалах.

### Список литературы

1. Dmitrij Rappoport, Nathan R. M. Crawford, Filipp Furche, Kieron Burke Which functional should I choose / Rappoport Dmitrij, Crawford Nathan R. M., Furche Filipp, Burke Kieron // *Computational Inorganic and Bioinorganic Chemistry* – 2008
2. Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple / J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Physical Review Letters* 1996 3865-3868c.
3. Henderson, T. M., Janesko, B. G., & Scuseria, G. E. Generalized gradient approximation model exchange holes for range-separated hybrids / T. M Henderson., B. G Janesko, G. E. Scuseria, // *The Journal of Chemical Physics* 2008 128c.

UDC 535.343.2

## THE GENERALIZED GRADIENT APPROXIMATION METHOD IN THE FORM OF PBE FOR DETERMINING THE BAND GAP OF SEMICONDUCTOR

*Shedun A.V., Markusenko N.S.*

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus*

*Yashchuk V.A. – master, assistant professor of the ICSD department*

**Annotation.** Review of the methodology of PBE functional application for determining the thickness of the band gap of semiconductors. Important aspects related to electronic structure calculations and density functional theory are considered.

**Keywords.** Band gap, semiconductors, ensity functional theory, local density approximation, generalized gradient approximation, functional Perdew-Berk-Ernzerhof