

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра физики твердого тела

УДК 537.3:669.7

ДИПЛОМНАЯ РАБОТА

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВА ДВУМЕРНЫХ
ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ СИСТЕМ**

Студента VI курса
Лабоцкого Сергея Владимировича

Научный руководитель
доцент, канд. физ-мат. наук
Дорожкин Николай Николаевич

Рецензент
профессор, доктор физ-мат. наук
Лобко Александр Сергеевич

«ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ»

Зав. кафедрой физики твердого тела

Профессор _____ В. В. Углов

«___» _____ 2016 г.

МИНСК 2016

РЕФЕРАТ

Дипломная работа 35 с., 19 рис., 3 табл., 12 источников

Объект исследования – тонкие пленки висмута и висмута с сурьмой и мышьяком.

Предмет исследования – структурные и электронные свойства.

Цель работы – поиск полупроводниковых висмутсодержащих структур, перспективных для использования в термоэлектрических устройствах.

Метод исследования – компьютерное моделирование в рамках функционала электронной плотности с помощью линейного метода присоединенных плоских волн.

Основные результаты исследований: обнаружено, что структуры Bi-Sb и Bi-Sb-Bi-Sb являются полупроводниками и могут найти применение в термоэлектрических устройствах.

РЭФЕРАТ

Дыпломная работа 35 с., 19 малюнкаў, 3 табл., 12 крыніц.

Аб'ект даследавання – тонкія плёнкі вісмута і вісмута з сурмой і мыш'яком.

Прадмет даследавання – структурныя і электронныя ўласцівасці.

Мэта работы – пошук паўправадніковых вісмутзмяшчаючых структур, перспектывных для выкарыстання у тэрмаэлектрычных прыладах.

Метад даследавання – камп'ютэрнае мадэляванне у рамках функцыянала электроннай шчыльнасці з дапамогай лінейнага метада далучаных плоскіх хваляў.

Асноўныя вынікі даследавання: выяўлена, што структуры Bi-Sb і Bi-Sb-Bi-Sb з'яўляюцца паўправаднікамі і могуць знайсці прымяненне у тэрмаэлектрычных прыладах.

ABSTRACT

Diploma work 35 p., 19 figures, 32 tables, 12 sources.

Object of study – thin films of bismuth and bismuth with antimony and arsenic.

Subject of research –structure and electronic properties.

Purpose – search of semiconductors comprising bismuth structures

The method of investigation - computer simulation in the frame of the density functional theory with the linear augmented plane wave method.

Basic results of investigations: found that the structure of Bi-Sb and Bi-Sb-Bi-Sb are semiconductors and can be used in thermoelectric devices.