

## Vakanču aprēķini halkopirītos no pirmajiem principiem

A. Gopejenko<sup>1</sup>, J. Grechenkov<sup>1</sup>, D. Bocharov<sup>1</sup>, A.I. Popov<sup>1</sup>, M. G. Brik<sup>2</sup>, S. Piskunov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

<sup>2</sup>Fizikas institūts, Tartu universitāte

Saules baterijās priekšroka tiek dota materiāliem ar izteikti simetrisku kristāla struktūru un tiešo aizliegtu zonu. Halkopirīti (CP), kuri ir trīskomponentu pusvadītāji ar vispārējo ķīmisko formulu I-III-VI<sub>2</sub> (I = Cu, Ag, III = In, Ga, Al, VI = S, Se, Te utt.) vai II-IV-V<sub>2</sub> (II = Be, Mg, Zn, Cd, IV = C, Si, Ge, Sn, V = N, P, As, Sb utt.) ir viens no šādu materiālu piemēriem. Ķīmiskā sastāva elastība ļauj precīzi regulēt CP cieto šķīdumu strukturālās un fizikālās īpašības, daļēji vai pilnībā aizstājot katjonus vai anjonus.

Pirmo principu blīvuma funkcionāla teorijas aprēķinu modelis CP materiālu aprēķiniem bija izveidots uz CuGaS<sub>2</sub> un CuGaSe<sub>2</sub> pamata. Aprēķini bija veikti izmantojot CRYSTAL17 datorkodu.

Tika veikti testu aprēķini lai izvēlētos piemērotāko apmaiņas korelācijas funkcionāli tālākai CP materiālu modelēšanai. Tika konstatēts, ka izmantojot *Heyd-Scuseria-Ernzerhof* hibrīda apmaiņas korelācijas funkcionāli (HSE06) iegūtas režģa konstantes un aizliegtas zonas platuma vērtības labāk saskaņojas ar eksperimentāliem datiem salīdzinot ar citiem hibrīda apmaiņas korelācijas funkcionāļiem.

Bija izveidoti modeļi  $V_{Cu}$  un  $V_{Ga}$  aprēķiniem izmantojot superšūnu ar  $2 \times 2 \times 1$  paplašinājumu.

### *Ab initio* calculations of vacancies in chalcopyrites

A. Gopejenko<sup>1</sup>, J. Grechenkov<sup>1</sup>, D. Bocharov<sup>1</sup>, A.I. Popov<sup>1</sup>, M. G. Brik<sup>2</sup>, S. Piskunov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Solid State Physics, University of Latvia

<sup>2</sup>Institute of Physics, University of Tartu

Materials with a highly symmetrical crystal structure and direct band gap are preferred in solar cells. Chalcopyrites (CP), which are ternary semiconductors with the general chemical formula I-III-VI<sub>2</sub> (I=Cu, Ag, III=In, Ga, Al, VI=S, Se, Te, etc.) or II-IV-V<sub>2</sub> (II=Be, Mg, Zn, Cd, IV=C, Si, Ge, Sn, V=N, P, As, Sb, etc.) are one of the example of such materials. Flexibility of chemical composition allows fine-tuning of the structural and physical properties of CP solid solutions by partial or complete substitution of cations or anions.

The model for the first principle DFT calculations of CP materials has been created based on CuGaS<sub>2</sub> and CuGaSe<sub>2</sub>. The calculations have been performed using CRYSTAL17 computer code.

Series of test calculations have been performed to choose the most suitable exchange-correlation functionals for further modelling of CP materials. The values of the lattice constants and band gaps received using *Heyd-Scuseria-Ernzerhof* hybrid exchange-correlation functional (HSE06) was found to be in the best agreement with experimental data compared with other hybrid exchange-correlation functionals.

Models for  $V_{Cu}$  and  $V_{Ga}$  have been constructed using a supercell with  $2 \times 2 \times 1$  extension.

Financial support provided by Scientific Research Project for Students and Young Researchers “*Ab initio* calculations of defective ternary chalcopyrites for photovoltaic applications” realized at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia is greatly acknowledged.