

УДК 621.315 : 535.215

PACS 31.15.A, 31.15.ae, 71.15.Mb, 71.20.-b, 74.20.Pq, 73.21.Cd

DOI: 10.24144/2415-8038.2016.40.80-91

Л.Ю. Хархалис, К.Є. Глухов, Т.Я. Бабука

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54

e-mail: lkharkhalis@gmail.com

ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА ТА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВІ КРИСТАЛІВ In_4Se_3 І In_4Te_3

Представлено першопринципні розрахунки електронної структури та оптичних властивостей гетероструктур на основі шаруватих орторомбічних кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3 . Одержано зонну структуру, просторовий розподіл електронної густини, дисперсійні залежності коефіцієнта поглинання для різних поляризацій світла для гетероструктур типу $(\text{In}_4\text{Se}_3)_m/(\text{In}_4\text{Te}_3)_m$ та проведено їх порівняння з об'ємними кристалами In_4Se_3 і In_4Te_3 . Показано, що з зростанням товщини гетероструктури має місце збільшення ширини забороненої зони та, відповідно, розширення спектральної області, що узгоджується з експериментальними даними. Це вказує на можливість утворення стабільних гетероструктур $(\text{In}_4\text{Se}_3)_m/(\text{In}_4\text{Te}_3)_m$, які можуть забезпечити значну фоточутливість в близькій і середній інфрачервоних областях.

Ключові слова: гетероструктура, селеніди індію, електронна зонна структура, просторовий розподіл електронної густини, дисперсійна залежність коефіцієнта поглинання

Вступ

Нові дослідження для кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3 , які останнім часом з'являються у літературі, наприклад, виявлені унікальні термоелектричні властивості [1], явище оптичного підсилення [2], створення гетероструктур [3,4], і т.д., свідчать про надзвичайний інтерес до даних сполук як перспективних матеріалів для сучасної оптоелектроніки, наноелектроніки та термоелектрики. Особлива будова цих кристалів дозволяє отримувати в умовах надвисокого вакууму досконалі поверхні сколювання з борознистим рельєфом [5,6], завдяки чому розширюються їхні потенційні можливості для виготовлення приладів нанометрових розмірів.

Належить виділити і новий експериментально доведений результат по модифікації структурно-фазового складу перехідного шару в контактах метал- In_4Se_3 за рахунок фазового перетворення при малопотужних лазерних опроміненнях [7,8]. Встановлені технологічні режими таких опромінювань на контактах $\text{Al}(\text{Au})\text{-In}_4\text{Se}_3$ можуть мати важливе практичне застосування, що

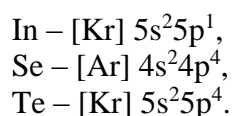
передбачає промислове використання матеріалів In_4Se_3 як елементної бази для селективних оптичних фільтрів і фотоприймачів природного та поляризованого випромінювання. З цією метою створювалися структури, утворені при лазерному опроміненні In_4Se_3 , і гетеропереходи $\text{In}_2\text{O}_3\text{-In}_4\text{Se}_3$, $\text{InSe-In}_4\text{Se}_3$, $\text{Ge-In}_4\text{Se}_3$, виготовлені термохімічним способом [3,4,9-11]. Також встановлено, що новими матеріалами для ІЧ техніки є гетероструктури на основі In_4Se_3 і In_4Te_3 та їх твердих розчинів, одержані рідинною епітаксією. Вони фоточутливі в спектральному діапазоні 1-2.5 мкм при кімнатній температурі, які мають високе значення питомої здатності. Найбільший зсув фоточутливості у довгохвильову має місце в гетероструктурі $n\text{-In}_4\text{Se}_3 - p\text{-In}_4\text{Te}_3$ [4]. Поліпшення фотоелектричних параметрів пристроїв на основі цих матеріалів вимагає пошуку нових технологічних методів формування в першу чергу досконалої межі $p\text{-}n$ -переходу. З іншої сторони, зважаючи на прикладне застосування гетероструктур на основі кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3 , представляє

також інтерес моделювання таких гетеро-переходів та дослідження їх електронних і оптичних властивостей.

Кристалічна та електронна структура In_4Se_3 і In_4Te_3

Сполуки In_4Se_3 і In_4Te_3 завдяки складній кристалічній будові займають особливе місце серед сильно анізотропних структур. Вони належать до групи шарувато-ланцюгових матеріалів і кристалізуються у ромбічній сингонії $Pn\bar{m}$ (D_{2h}^{12}) з близькими параметрами ґратки (табл.1, 2) [12]. Елементарна комірка містить 28 атомів, які утворюють гофровану структуру, що складається з нескінченних неплоских шарів-молекул із послабленим міжмолекулярним зв'язком. Укладання цих молекул подібне як у звичайних молекулярних кристалах (рис.1). Як для кристалу In_4Se_3 , так і для In_4Te_3 між $[\text{In}_3\text{Se}(\text{Te})_3]$ -шарами утворюються великі канали, в яких розташовані нескінченні одновимірні ланцюги іонів In^+ (атоми In4) вздовж напрямку [001], що знаходяться на відстані $d_{\text{In-In}} = c$ один від одного. Температурний фактор Дебая-Уоллера для цього атому значно перевищує значення для інших атомів.

На рис.2 і 3 представлено розраховані нами у *ab initio* підході зонні структури для орторомбічних кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3 . При моделюванні було використано теорію функціонала електронної густини, реалізовану у пакеті ABINIT [13]. Обмінно-кореляційна взаємодія враховувалася у лінійному наближенні (LDA) [14,15], псевдопотенціали атомів вибиралися у параметризації Хорвігзена-Гоедекера-Хаттера [HGH]. Електронні конфігурації атомів індію, селену та телуру були наступні:



Тут основні стани виділені квадратними дужками. База плоских хвиль, що використовувалась для розкладу псевдохвильових функцій, була обмежена енергією відсічки

740 еВ. Інтегрування по зоні Брілюєна здійснювалося методом тетраєдрів, побудованих по сітці особливих точок, обраних за алгоритмом Монхорста-Пака [16] зі щільністю $3 \times 3 \times 1$. Спінкові ступені вільності електронів у даному розрахунку не враховувалися.

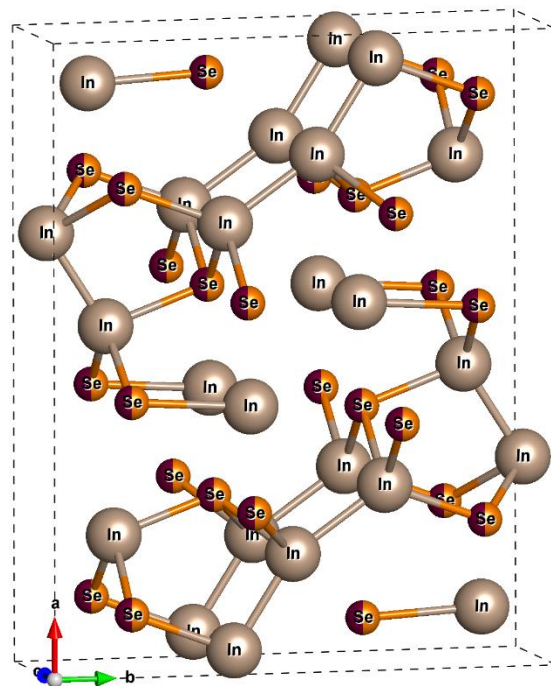


Рис. 1. Елементарна комірка кристалів $\text{In}_4\text{Se}(\text{Te})_3$

Як видно з Рис.2, 3, зонні спектри для обох кристалів є дуже подібними. Точки локалізації екстремумів як зони провідності, так і валентної зони співпадають. Теоретично розрахована ширина забороненої зони для кристалу In_4Te_3 складає $E_g \sim 0.163$ еВ, в той час як для In_4Se_3 $E_g \sim 0.269$ еВ.

Таблиця 1

Параметри ґратки кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3 [12]

	In_4Se_3	In_4Te_3
$a, \text{Å}$	15.296(1)	15.619(1)
$b, \text{Å}$	12.308(1)	12.749(1)
$c, \text{Å}$	4.0806(5)	4.4348(3)

Таблиця 2.

Відносні координати атомів для кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3 [12]

	In_4Se_3				In_4Te_3		
	X	Y	Z		X	Y	Z
In1	0.71105(8)	0.33933(9)	0.0	In1	0.71543(4)	0.34555(4)	0.0
In2	0.81578(8)	0.52362(10)	0.0	In2	0.81716(4)	0.52501(5)	0.0
In3	0.96733(7)	0.64423(11)	0.0	In3	0.96387(3)	0.64590(4)	0.0
In4	0.42369(9)	0.39749(11)	0.0	In4	0.42749(4)	0.39773(6)	0.0
Se1	0.90329(10)	0.84943(13)	0.0	Te1	0.90350(3)	0.86013(4)	0.0
Se2	0.76875(10)	0.13857(13)	0.0	Te2	0.77394(3)	0.13745(4)	0.0
Se3	0.42410(10)	0.15595(13)	0.0	Te3	0.42264(3)	0.14809(4)	0.0

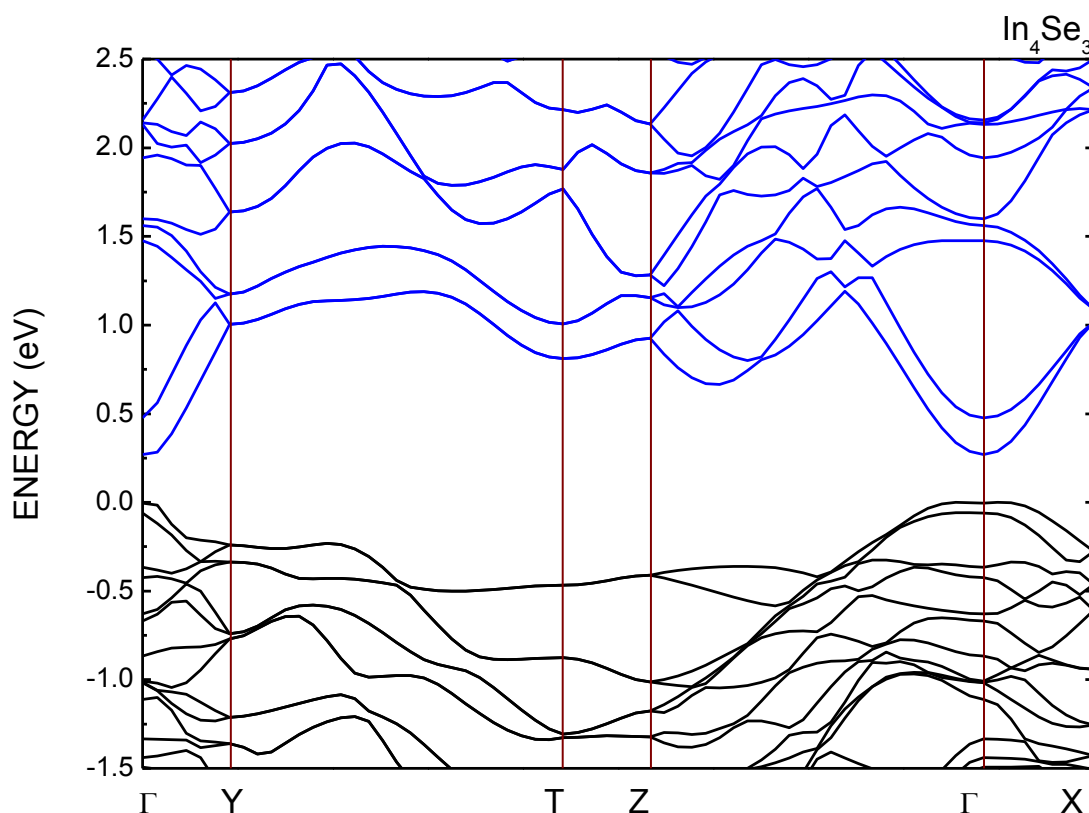


Рис.2. Зонна структура кристалу In_4Se_3 з першопринципних обчислень

$$\left(\Gamma-(0,0,0); X-\left(\frac{\pi}{a_1}, 0, 0\right); Y-\left(0, \frac{\pi}{a_2}, 0\right); Z-\left(0, 0, \frac{\pi}{a_3}\right)\right);$$

Моделювання гетероструктур на основі кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3

Необхідними умовами для створення гетероструктур типу $(\text{In}_4\text{Se}_3)_m/(\text{In}_4\text{Te}_3)_m$ є наявність матеріалів з різним типом провідності, а також сумісність їх кристалічних параметрів (розузгодженість параметрів ґратки складає 2%) та подібність зонних структур. Оскільки сполука In_4Se_3 має більшу ширину забороненої зони

($E_{g\text{exp}} \sim 0.62-0.8$ eV) у порівнянні з кристалом In_4Te_3 ($E_{g\text{exp}} \sim 0.46$ eV) то, відповідно, вона характеризується більшою фоточутливістю, що підтверджується експериментальними дослідженнями [4].

На рис.4 і 5 представлені різні типи гетероструктур $(\text{In}_4\text{Se}_3)_m/(\text{In}_4\text{Te}_3)_m$. Конструювання гетероструктури проводилося таким чином, що атоми Se в одному із шарів замінювались атомами Te, зберігаючи при цьому періодичність структури.

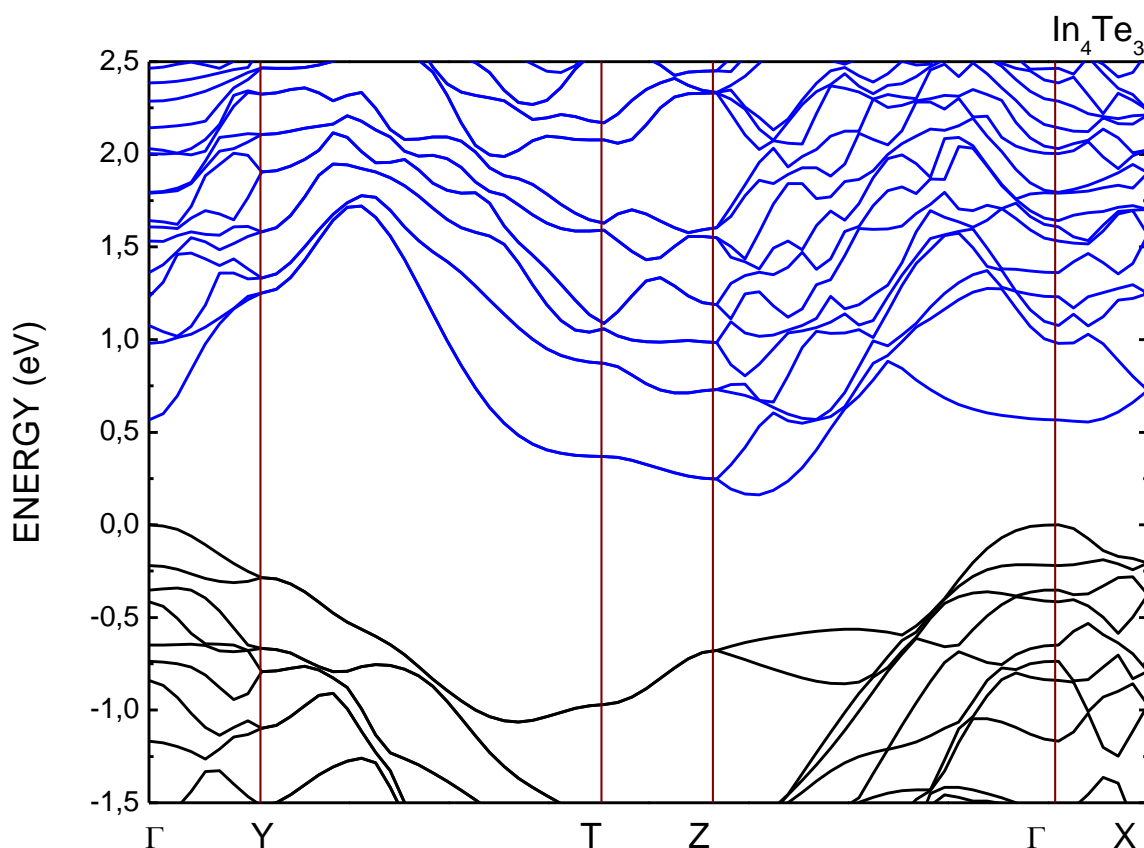


Рис.3. Зонна структура кристалу In_4Te_3

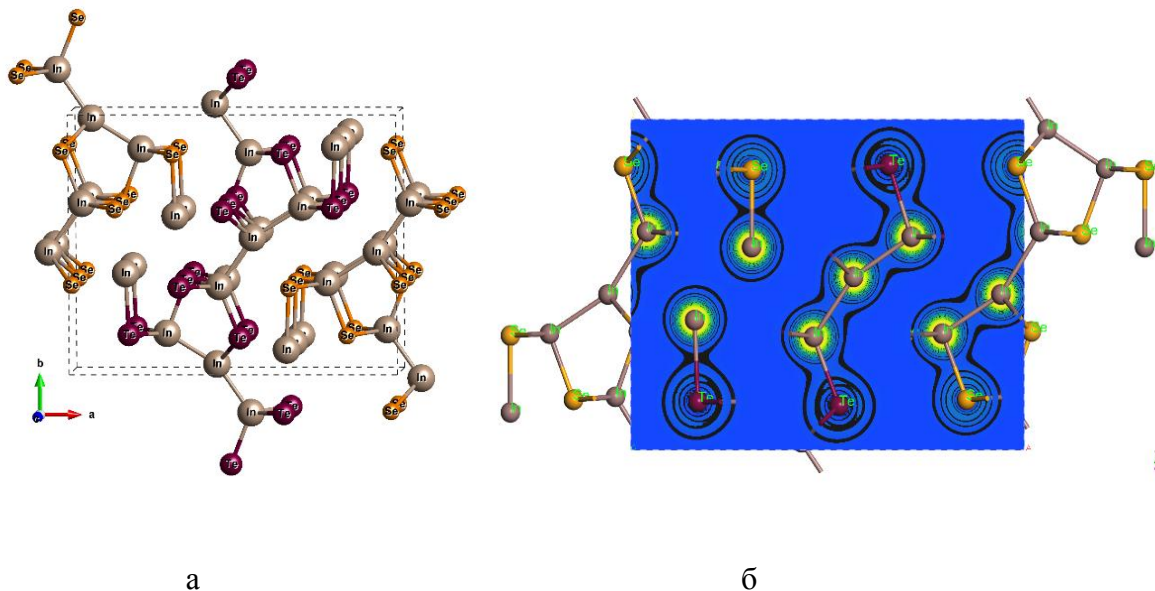


Рис.4. Елементарна комірка (а) та просторовий розподіл густини валентних електронів (б) для гетероструктури $(\text{In}_4\text{Se}_3)_1/(\text{In}_4\text{Te}_3)_1$

Обидві системи є геометрично оптимізовані для одержання стабільної атомної конфігурації. Як для гетероструктури $(\text{In}_4\text{Se}_3)_1/(\text{In}_4\text{Te}_3)_1$, так і для $(\text{In}_4\text{Se}_3)_2/(\text{In}_4\text{Te}_3)_2$ має місце пониження симетрії та зміна параметрів ґратки. Зокрема, гетероперехід $(\text{In}_4\text{Se}_3)_1/(\text{In}_4\text{Te}_3)_1$ описується

просторовою групою C_{2v}^7 , параметри елементарної комірки якого рівні $a = 15.8628$ Å, $b = 12.5499$ Å, $c = 4.1430$ Å, а більш складна гетероструктура $(\text{In}_4\text{Se}_3)_2/(\text{In}_4\text{Te}_3)_2$ характеризується просторовою групою C_{2h}^1

і має параметри ґратки $a = 30.5920$ А,
 $b = 12.3080$ А, $c = 4.08100$ А.

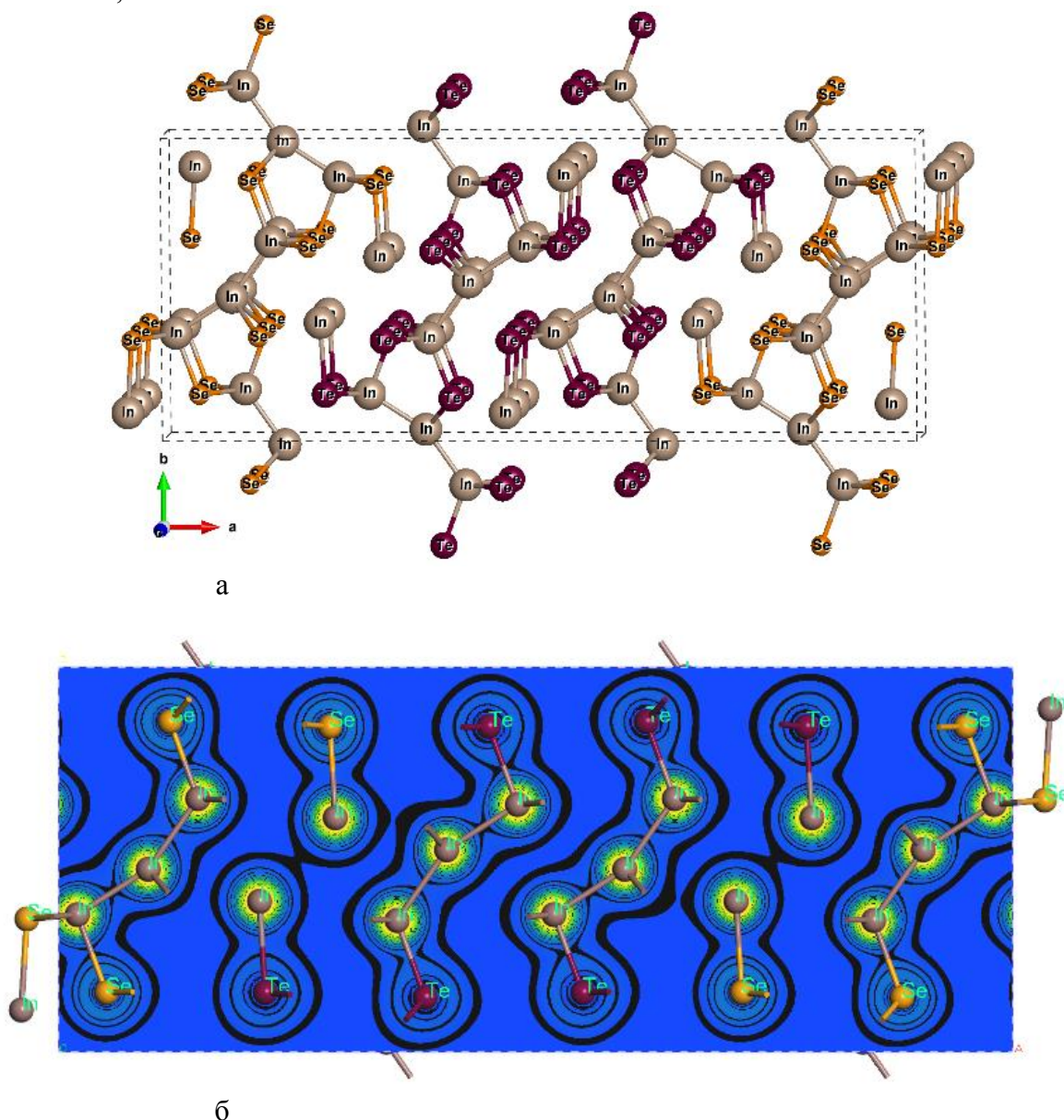


Рис.5. Елементарна комірка (а) та просторовий розподіл густини валентних електронів (б) для гетероструктури $(\text{In}_4\text{Se}_3)_2/(\text{In}_4\text{Te}_3)_2$

Групою C_{2v}^7 , параметри елементарної комірки якого рівні $a = 15.8628$ А, $b = 12.5499$ А, $c = 4.1430$ А, а більш складна гетероструктура $(\text{In}_4\text{Se}_3)_2/(\text{In}_4\text{Te}_3)_2$ характеризується просторовою групою C_{2h}^1 і має параметри ґратки $a = 30.5920$ А, $b = 12.3080$ А, $c = 4.08100$ А. Згідно оцінок повної енергії розглядувані гетероструктури є стійкими. Про це свідчить також і просторовий розподіл електронної густини. Як впливає з рис.4 (б) і 5 (б), у порівнянні з об'ємними кристалами In_4Se_3 і In_4Te_3 із зростанням періоду структури (для $(\text{In}_4\text{Se}_3)_2/(\text{In}_4\text{Te}_3)_2$)

спостерігається збільшення перекриття хвильових функцій атомів In, які належать різним шарам на гетеромежі: шару з атомами Se і шару з атомами Te.

Зонна структура та оптичні властивості надґраток $(\text{In}_4\text{Se}_3)_m/(\text{In}_4\text{Te}_3)_m$

Розраховані зонні спектри $(\text{In}_4\text{Se}_3)_1/(\text{In}_4\text{Te}_3)_1$ і $(\text{In}_4\text{Se}_3)_2/(\text{In}_4\text{Te}_3)_2$ приведені на рис.6 і 7. Перешопринципні обчислення проводились в тому ж наближенні, що і для об'ємних кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3 .

Основним результатом, як впливає з рис.6 і 7, є зміна ширини забороненої зони

($E_g \sim 0.154$ eV для $(\text{In}_4\text{Se}_3)_1/(\text{In}_4\text{Te}_3)_1$ і $E_g \sim 0.363$ eV для $(\text{In}_4\text{Se}_3)_2/(\text{In}_4\text{Te}_3)_2$). Точки локалізації основних екстремумів для валентної зони та зони провідності, як і для об'ємних кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3 зосереджені в точці Γ . Незначних трансформацій

зазнає притаманна даним кристалом низькоенергетична непараболічність в околі центра зони Бріллюена.

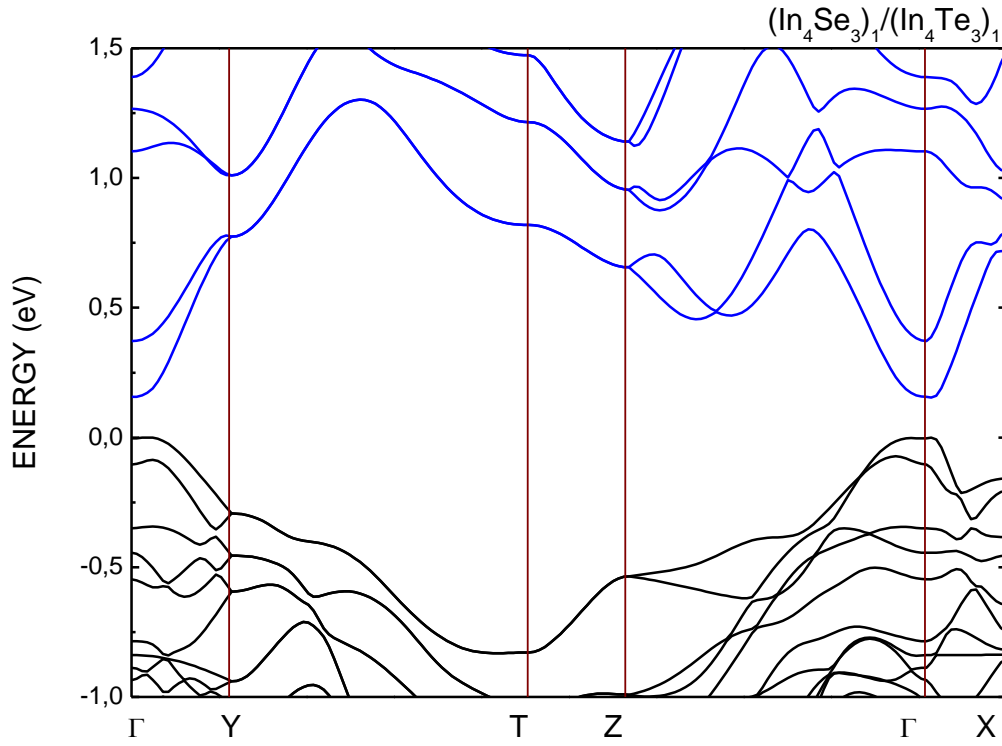


Рис.6. Зонна структура $(\text{In}_4\text{Se}_3)_1/(\text{In}_4\text{Te}_3)_1$

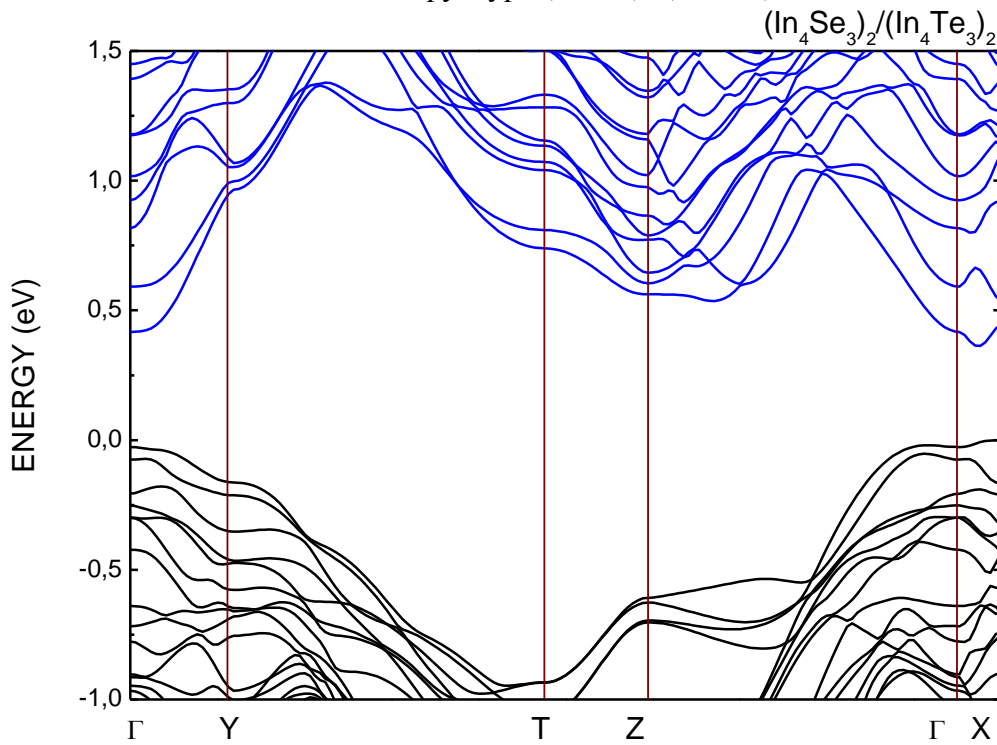


Рис.7. Зонна структура $(\text{In}_4\text{Se}_3)_2/(\text{In}_4\text{Te}_3)_2$

Оптичні характеристики нами розраховувалися згідно теорії фундаментального поглинання [17] (1), причому хвильові функції розраховувалися з перших принципів, а

$$\varepsilon_2(\vec{q} \rightarrow 0, \hbar\omega) = \frac{2e^2\pi}{\Omega\varepsilon_0} \sum_{\vec{k},c,v} \left| \langle \Psi_{\vec{k}}^c | \vec{u} \cdot \vec{r} | \Psi_{\vec{k}}^v \rangle \right|^2 \delta(E_{\vec{k}}^c - E_{\vec{k}}^v - \hbar\omega) \quad (1)$$

$$\varepsilon_1(\omega) = \frac{1}{\pi} v \cdot p \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_2(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (2)$$

Зв'язок між реальною і уявною частинами діелектричної функції з показником заломлення і коефіцієнтом поглинання описується рівняннями

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2, \quad \varepsilon_2 = 2nk, \quad (3)$$

дійсна частина діелектричної проникності визначалася з відомих співвідношень Крамера-Кроніга (2):

а коефіцієнт поглинання визначається як

$$\alpha = \frac{2k\omega}{c} \quad (4)$$

На рис.8 і 9 представлено дисперсійні залежності коефіцієнта поглинання для кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3 та надграток $(\text{In}_4\text{Se}_3)_1/(\text{In}_4\text{Te}_3)_1$ (а) і $(\text{In}_4\text{Se}_3)_2/(\text{In}_4\text{Te}_3)_2$ (б).

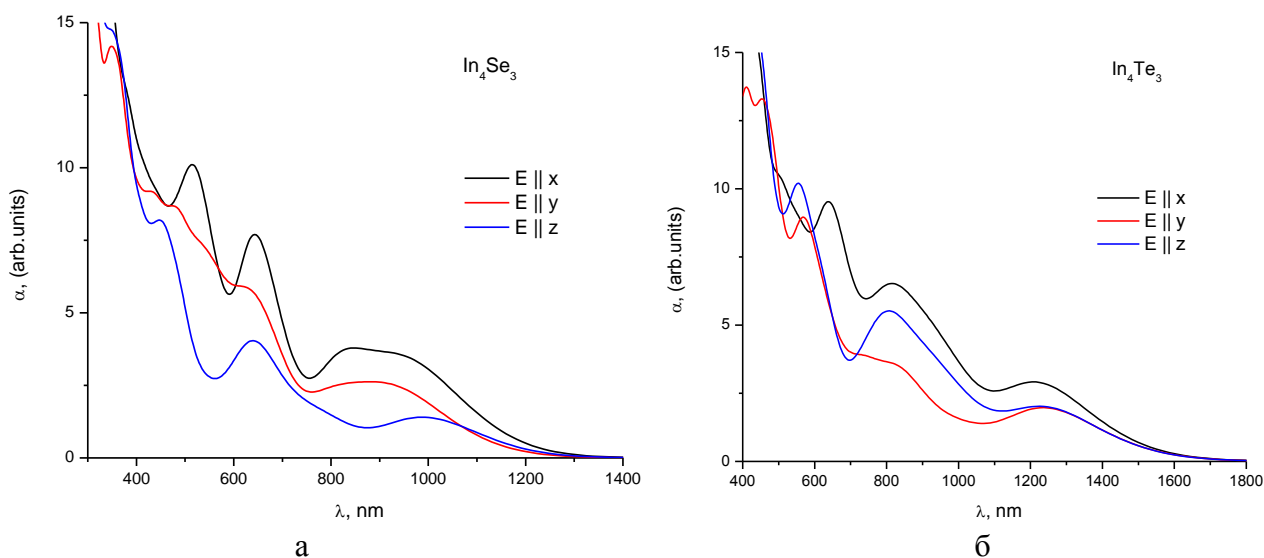


Рис. 8. Залежність коефіцієнта поглинання від довжини хвилі для кристалу In_4Se_3 і In_4Te_3

Аналізуючи дисперсійні залежності коефіцієнта поглинання, бачимо, що оптичний відклик суттєво залежить від поляризації світла. Коефіцієнт поглинання для всіх розглянутих структур виявляє в своїх спектрах анізотропію, що є результатом анізотропної кристалічної будови. Для поляризації $E||x$ на відміну від поляризацій світла $E||y$ і $E||z$ спектр поглинання для ідеального кристалу In_4Se_3 містить виділені

піки в області довжин хвиль 500-700 нм та широкий пік в області 800-1200 нм, а для кристалу In_4Te_3 широкий пік є зміщений в область 1100-1600 нм. З утворенням гетероструктури відбувається не тільки розширення спектральної області, але і поява додаткових піків в області $\lambda=800-1300$ нм при $E||x$.

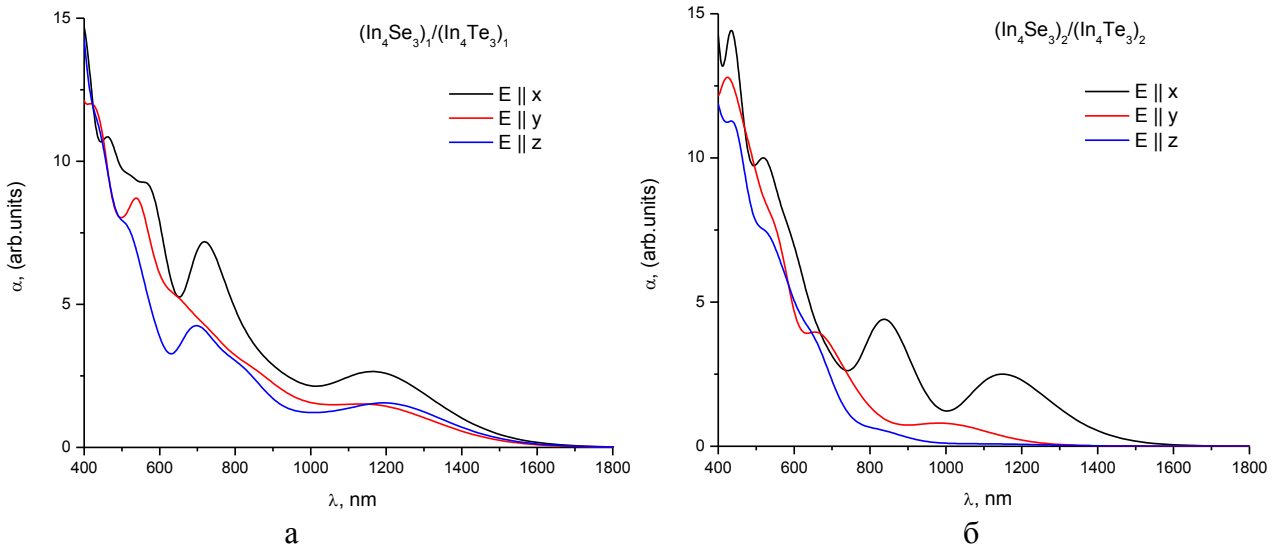


Рис.9. Залежність коефіцієнта поглинання від довжини хвилі для надграток $(\text{In}_4\text{Se}_3)_1/(\text{In}_4\text{Te}_3)_1$ (а) та $(\text{In}_4\text{Se}_3)_2/(\text{In}_4\text{Te}_3)_2$ (б)

Висновки

Таким чином, в даній роботі ми провели першопринципні розрахунки зонного спектру, просторового розподілу електронної густини, дисперсійних залежностей коефіцієнта поглинання для різних поляризацій світла для шаруватих орторомбічних кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3 та гетероструктур типу $(\text{In}_4\text{Se}_3)_1/(\text{In}_4\text{Te}_3)_1$ і $(\text{In}_4\text{Se}_3)_2/(\text{In}_4\text{Te}_3)_2$ на їх основі. Встановлена еволюція змін в симетрії кристалічної ґратки, енергетичному спектрі та оптичних характеристиках в порівнянні з об'ємними кристалами. Зокрема, згідно наших *ab initio* розрахунків із зростанням товщини гетероструктури має місце збільшення ширини забороненої зони та,

відповідно, розширення спектральної області, що узгоджується з експериментальними даними. Отже, проведені нами дослідження вказують на можливість утворення стабільних гетероструктур типу $(\text{In}_4\text{Se}_3)_m/(\text{In}_4\text{Te}_3)_m$, які можуть забезпечити значну фоточутливість в близькій і середній інфрачервоних областях. Одержані енергетичні і структурні параметри можуть бути також використані для моделювання контраваріантних надграток $(\text{In}_4\text{Se}_3)_m/(\text{In}_4\text{Te}_3)_n$ з різними періодами в моделі Кроніґа-Пенні та методу матриць переносу.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Rhyee J.-S., Lee K.H., Lee S.M. [et al.] (2009), "Peierls distortion as a route to high thermoelectric performance in In_4Se_3 ", Nature, V. 459, N 18. pp. 965-968.
2. Bercha D.M., Glukhov K.E., Sznajder M. (2011), "Gain Spectrum for the In_4Se_3 Crystal with a Non-standard Dispersion Law of Charge Carriers", Acta Physica Polonica A., V. 119, N. 5, pp. 720 – 722.
3. Волянська Т.А., Грицюк Б.М., Мошкова Т.С., та ін. (2000), "Фотоелектричні властивості епітаксійних гомо- і гетероструктур на основі $\text{In}_4(\text{Se}_3)_{1-x}\text{Te}_3x$ ", Науковий вісник Чернівецького університету, Вип. 79. Фізика. Електроніка. С. 19-21.
4. Грицюк Б.М., Стребжев В.М., Юрійчук І.М. (2012), "Епітаксійні гетероструктури $\text{In}_4\text{Se}_3\text{-In}_4\text{Te}_3$, $\text{In}_4\text{Se}_3\text{-Ge}$ ", Науковий

- вісник Чернівецького університету, Том 2.- Вип. 1. Фізика. Електроніка. - С. 34-38.
5. Галій П.В., Ненчук Т.М., Дверій О.Р. та ін. (2009), “Нановимірні дослідження поверхні (100) шаруватого кристалу In_4Se_3 ”, Фізика і хімія твердого тіла, Т.10, №4, С.813-818.
 6. Galiy P.V., Ciszewski A., Dveriy O.R. [et al.] (2009), “Investigation of (100) In_4Se_3 crystal surface nanorelief”, Functional Materials, Vol. 16, No. 3, pp. 279-285.
 7. Воробець О.І. (2007), „Модифікація властивостей бар’єрних структур метал-халькогенідний напівпровідник імпульсним лазерним опроміненням”: автореф. дисерт. на здобуття наук. ступеня канд. фіз.- мат. наук: спец. 01.04.10 “Фізика напівпровідників і діелектриків”, Чернівці, 20 с.
 8. Melnychuk T.A., Strebegev V.N., Vorobets G.I. (2007), „Laser synthesis of thin films and layers of In_4Se_3 , In_4Te_3 and modification of their structure”, Applied Surface Science, Vol. 254., pp. 1002-1006.
 9. Катеринчук В.Н., Ковалюк М.З. (2010), „Пленки вырожденных собственных окислов полупроводниковых кристаллов InSe и In_4Se_3 ”, ФТП, Т.44, №9. С. 1212-1215, 2010.
 10. Воробець Г.І., Стребезев В.М., Рогов Р.В. (2009), “Алгоритм і пакет програм для оптимізації параметрів інтерференційних фільтрів”, Науковий вісник Чернівецького університету, Вип. 479, С. 157-160.
 11. Катеринчук В.М., Ковалюк З.Д., Кушнір Б.В., Литвин О.С. (2016), “Фотоелектричні властивості гетеропереходів власний оксид $p\text{-In}_4\text{Se}_3$ ”, Журнал нано- та електронної фізики, Том 8, № 3, С. 03032(4с).
 12. Hogg J.H.C., Sutherland H.H., Williams D.J. (1971), “Crystallographic Evidence for the existence of the phases In_4Se_3 and In_4Te_3 which contain the homonuclear triatomic cation $(\text{In}_3)_5^+$ ”, Chem.Commun. No 23. pp. 1568-1569.
 13. Gonze X., Beuken J. M., Caracas R., Detraux F., Fuchs M., Rignanese G.M., Sindic L., Verstraete G., Zerah G., Jollet F., Torrent M., Roy A., Mikami M., Ghosez Ph., Raty J.-Y., Allan D.C. (2002), “First-principles computation of material properties: the ABINIT software project”, Comput. Mater. Sci. 25, 478.
 14. Hohenberg P., Kohn W. (1964), “Inhomogeneous Electron Gas”, Phys. Rev., V. 136, 3, pp. B864–B871.
 15. Kohn W., Sham L.J. (1965), “Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects”, Phys. Rev., V. 140, № 4, pp. A1133–A1138.
 16. Monkhorst H.J., Pack J.D. (1976), “Special points for Brillouin-zone integrations”, Phys. Rev. B., V. 13, № 12, P. 5188–5192.
 17. Бассани Ф., Пастори Парравичини Дж. (1982), “Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах”, Москва.:Наука, 388 с..

Стаття надійшла до редакції 20.11.2016

Л.Ю. Хархалис, К.Е. Глухов, Т.Я. Бабука

Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул.Волошина, 54

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВАНИИ КРИСТАЛЛОВ In_4Se_3 И In_4Te_3

Представлены первопринципные расчёты электронной структуры и оптических свойств гетероструктур на основании слоистых орторомбических кристаллов In_4Se_3 и In_4Te_3 . Получено зонную структуру, пространственное распределение электронной плотности, дисперсионные зависимости коэффициента поглощения для разных поляризаций света для гетероструктур типа $(\text{In}_4\text{Se}_3)_m/(\text{In}_4\text{Te}_3)_m$ и проведено их сравнение с объёмными кристаллами In_4Se_3 и In_4Te_3 . Показано, что с возрастанием толщины гетероструктуры имеет место увеличение ширины запрещённой зоны, и, соответственно, расширение спектральной области, что совпадает с экспериментальными данными. Это указывает на возможность образования стабильных гетероструктур $(\text{In}_4\text{Se}_3)_m/(\text{In}_4\text{Te}_3)_m$, которые могут обеспечить существенную фоточувствительность в близкой и средней инфракрасной областях.

Ключевые слова: гетероструктура, селениды индия, электронная зонная структура, пространственное распределение электронной плотности, дисперсионная зависимость коэффициента поглощения

L.Yu. Kharkhalis, K.E. Glukhov, T.Ya. Babuka
Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54

ELECTRONIC STRUCTURE AND OPTICAL PROPERTIES OF THE HETEROSTRUCTURES ON THE BASIS OF THE In_4Se_3 AND In_4Te_3 CRYSTALS

Introduction. As it is known for today the photosensitive elements on the base of the homo- and heterojunctions with using of the semiconductor compounds In_4Se_3 , In_4Te_3 , and their solid solutions have been obtained by Van der Waals epitaxy method and laser restructuring. These orthorhombic crystals (D_{2h}^{12} space symmetry) are isostructural materials and lattice mismatching between constituent materials of heterostructure is equal to 2%. They have the similar band structures; the points of the extremes localizations for both the valence band and conduction band coincide. The In_4Se_3 crystal has the larger energy gap ($E_{g_{\text{exp}}}\sim 0.62\text{--}0.8\text{eV}$) than the In_4Te_3 one ($E_{g_{\text{exp}}}\sim 0.46\text{ eV}$). Thus, the considered crystals are governed by the favorable parameters for the construction of the heterostructures with the perfect interfaces. The formation of the $\text{In}_4\text{Se}_3/\text{In}_4\text{Te}_3$ heterostructure leads to widening of the spectral sensitivity range of the photoelements. It is established that these elements are sensitive within 1.0–2.0 μm and they are successfully used as infrared detectors and filters.

Purpose. To improve the spectral characteristics of the photosensitive devices it is of interest to study the electronic structure and optical properties of the different type heterostructures on the basis In_4Se_3 and In_4Te_3 materials.

Methods. In this work, we present a first-principles study of the electronic structure and optical properties of the heterostructures on the basis of the In_4Se_3 and In_4Te_3 layered orthorhombic compounds with using of the method of density functional in LDA- approximation.

Results. The band spectra, the spatial distribution of the electron density, the absorption coefficient for different polarizations along crystal axes were calculated.

Conclusion. The evolution of the changes in both energy spectrum and optical functions of the heterostructures in comparison with the In_4Se_3 and In_4Te_3 crystals has been analyzed. It is shown that the increase of the forbidden energy gap and consequently the widening of the of the spectral sensitivity range with the increase of the heterostructure thickness take place. Our calculations suggest a good agreement with experimental investigations. It points on the possibility of the formation of the stable heterostructures of the $(\text{In}_4\text{Se}_3)_m/(\text{In}_4\text{Te}_3)_m$ type which can ensured essential photosensitivity in the near and intermedium infrared region.

Keywords: heterostructure, indium selenides, electron band structure, spatial distribution of the electron density, dispersive dependence of the absorption coefficient

REFERENCES

1. Rhyee J.-S., Lee K.H., Lee S.M. [et al.] (2009), “Peierls distortion as a route to high thermoelectric performance in In_4Se_3 ”, *Nature*, V. 459, N 18. pp. 965-968.
2. Bercha D.M., Glukhov K.E., Sznajder M. (2011), “Gain Spectrum for the In_4Se_3 Crystal with a Non-standard Dispersion Law of Charge Carriers”, *Acta Physica Polonica A*, V. 119, N. 5, pp. 720 – 722.
3. Volyanska T.A., Grycyuk B.M., Moshkova T.S. [ta inshi] (2000), Cherniveck University Science Heard, Series Physics Electronics, Issue 40, Photovoltaic properties of epitaxial homo- and heterostructures based on $\text{In}_4(\text{Se}_3)_{1-x}\text{Te}_3x$ ”, [“Fotoelectrychni vlastivosti epitaksijnykh homoi heterostruktur na osnovi $\text{In}_4(\text{Se}_3)_{1-x}\text{Te}_3x$ ”, *Naukovyj visnyk Cherniveckogo universitetu*, Vyp. 79. Fizika. Elektronika,], pp. 19-21.
4. Grycyuk B.M., Strebezhev I.M., Grycyuk B.M., Yuriychuk V.N. (2012), Cherniveck University Science Heard, Series Physics Electronics, Issue 1 [“Epitaksijni heterostruktury In_4Se_3 - In_4Te_3 In_4Se_3 -Ge”, *Naukovyj visnyk Cherniveckogo universitetu*, Tom 2, Vyp. 1. Fizika. Elektronika], Vol. 2, pp. 34-38.
5. Galij P.V., Nenchuk T.M., Dverij O.R., [ta inshi] (2009), „Nano-dimensional Surface Survey (100) of In_4Se_3 Layered Crystal”, *Physics and Chemistry of Solid State*, [“Nanovymirni doslidzhennya poverkhni (100) sharuvatogo krystalu In_4Se_3 ”, *Fizika i khimija tverdogo tila*], Vol. 10, №4, pp.813-818.
6. Galij P.V., Ciszewski A., Dveriy O.R. [et al.] (2009), “Investigation of (100) In_4Se_3 crystal surface nanorelief”, *Functional Materials*, Vol. 16, No. 3, pp. 279-285.
7. Vorobec O.I. (2007), „Modification of properties of barrier structures of metal-chalcogenide semiconductor by pulsed laser irradiation”, [„Modifikacija vlastivostej barjernih struktur metal-chalkogenidnyj napivprovidnyk impulsnym lazernym oprominennyam”, avtoref. disert. na zdobuttya nauk.stupenyakand.fiz.-mat. Nauk], p. 20.
8. Melnychuk T.A., Strebegev V.N., Vorobets G.I. (2007), „Laser synthesis of thin films and layers of In_4Se_3 , In_4Te_3 and modification of their structure”, *Applied Surface Science*, Vol. 254., pp. 1002-1006.
9. Katerynychuk V.N., Kovalyuk M.Z. (2010), „Films of degenerate intrinsic oxides of InSe i In_4Se_3 semiconductor crystals”, *Solid State Physics* [„Plenki vyrozhdennykh sobstvennykh okislov polurovodnikovoykh kristallov InSe i In_4Se_3 ”, *FTP*], V.44, №9. pp. 1212-1215.
10. Vorobec G.I., Strebezhev V.M., Rogov R.V. (2009), „Algorithm and package of programs for optimization of parameters of interference filters”, *Cherniveck University Science Heard*, [„Algoritm i paket program dlya optimizaciji parametriv interferencijnykh filtriv”, *Naukovyj visnyk Cherniveckogo universitetu*], V. 479, pp. 157-160.
11. Katerynychuk V.M., Kovalyuk Z.D., Kushnir B.V., Lytvyn O.S. (2016), „Photovoltaic properties of heterojunctions in proper oxide p - In_4Se_3 ”, *Journal of Nano and Electronik Physics* [„Fotoelectrychni vlastivosti heteroperekhodiv vlasnyj oksid p - In_4Se_3 ”, *Zhurnal nano- ta electronnoji fizyky*], V. 8 № 3, p. 03032(4cc).
12. Hogg J.H.C., Sutherland H.H., Williams D.J. (1971), “Crystallographic Evidence for the existence of the phases In_4Se_3 and In_4Te_3 which contain the homonuclear triatomic cation $(\text{In}_3)^{5+}$ ”, *Chem.Commun.* No 23. pp. 1568-1569.
13. Gonze X., Beuken J. M., Caracas R., Detraux F., Fuchs M., Rignanese G.M., Sindic L., Verstraete G., Zerah G., Jollet F., Torrent M., Roy A., Mikami M., Ghosez Ph., Raty J.-Y., Allan D.C. (2002), “First-

- principles computation of material properties: the ABINIT software project”, *Comput. Mater. Sci.* 25, 478.
14. Hohenberg P., Kohn W. (1964), “Inhomogeneous Electron Gas”, *Phys. Rev.*, V. 136, 3, pp. B864–B871.
 15. Kohn W., Sham L.J. (1965), “Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects”, *Phys. Rev.*, V. 140, № 4, pp. A1133–A1138.
 16. Monkhorst H.J., Pack J.D. (1976), “Special points for Brillouin-zone integrations”, *Phys. Rev. B.*, V. 13, № 12, P. 5188–5192.
 17. Bassani F., Pastori Parraichini Dzh. (1982), „Electronic states and optical transitions in solids” [„Electronnie sostojanija I opticheskije perekhody v terdykh telakz”, Moskva.: Nauka], Moscow, p. 388.

© Ужгородський національний університет