**Исследование электронной структуры твердых растворов замещения диэлектрических кристаллов**

***Кондратьев И.М.***

*аспирант*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: kondratev-ildar@yandex.ru*

Смешанные сцинтилляционные кристаллы в форме твердых растворов с концентрацией компонентов в диапазоне от 20 до 80% часто демонстрируют более высокий световой выход и лучшее энергетическое разрешение по сравнению с исходными составляющими кристалла. Они также показывают более низкий уровень компонентов кинетики медленного затухания и меньшее послесвечение [1].

Пространственные флуктуации энергий электронных состояний, образующих дно зоны проводимости и верх валентной зоны, вносимые электронными состояниями атомов замещения, способствуют локализации носителей заряда, ограничивая их миграцию в кристалле. Таким образом уменьшается среднее расстояние между генетически связанными электронами и дырками, что увеличивает вероятность их связывания в экситон [2].

Ранее полученные с помощью модели твердого раствора данные и их сравнение с экспериментом, выполненным с использованием синхротронного излучения [2], подтверждают, что структура твёрдого раствора замещения сильно влияет на сцинтилляционные свойства широкозонных диэлектрических кристаллов.

Целью данного исследования является моделирование миграции носителей возбуждения в условиях образования кластеров, обогащенных одним из замещаемых компонентов твердого раствора. На базе параметров элементарных ячеек YPO4 и ScPO4 осуществляется построение твердого раствора ScxY1-xPO4 с учетом структурной оптимизации для минимизации полной энергии системы. А затем с помощью метода теории функционала плотности (DFT) получены структуры энергетических зон твердых растворов и соответствующие плотности состояний (DOS). Применяемый метод DFT основывается на разложении волновой функции системы на плоские волны. Использование готовых данных для псевдопотенциалов ионов различных элементов (описывают взаимодействие электронов и ионов системы) позволяет уменьшить количество базисных плоских волн и значительно ускорить расчеты. Таким образом получается теоретическая оценка электронной структуры твердого раствора. На базе полученных данных рассматриваются изменения сцинтилляционных свойств твердого раствора диэлектрических кристаллов в зависимости от его состава.

**Литература**

1. A.V. Gektin, A.N. Belsky, A.N. Vasil’ev, IEEE Trans. Nucl. Sci. 2014. V. 61. P. 262.

2. D. Spassky, A. N. Vasil’ev, V. Nagirnyi, I. Kudryavtseva, D. Deyneko, I. Nikiforov,

I. Kondratyev, B. Zadneprovski. Bright UV-C Phosphors with Excellent Thermal Stability – Y1−xScxPO4 Solid Solutions // Materials. 2022. V. 15(19). P. 6844.