

УДК 53.097; 539.21

## ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ И ПЕРЕСТРАИВАЕМЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО $\text{Li}_2\text{TeO}_3$ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Адितья Дей

*Оптические и электронные свойства кристаллического  $\text{Li}_2\text{TeO}_3$ , представляющего собой теллуритное стекло, изучаются в рамках теории функционала плотности (DFT), реализованной в программном обеспечении SIESTA. Материал имеет моноклинную симметричную структуру, и для изучения свойств была взята единичная или элементарная ячейка материала, периодическая во всех направлениях. Электронные структуры показывают, что это широкозонный полупроводник, и его свойства меняются на металлические при воздействии сильного электрического поля. Это настраиваемое свойство можно использовать в различных областях электроники. Изученные оптические свойства говорят о том, что  $\text{Li}_2\text{TeO}_3$  может быть многообещающим материалом для использования в качестве материала для переноса дырок (НТМ) для разработки эффективных перовскитных солнечных элементов, а также для других приложений.*

**Ключевые слова:** теллуритовое стекло, теория функционала плотности, электронные и оптические свойства, материал для переноса дырок.

Полный текст доступен в “Bulletin of the Lebedev Physics Institute”, том 48, № 5 (2021).

Поступила в редакцию 25 марта 2021 г.

После доработки 8 апреля 2021 г.

Принята к публикации 9 апреля 2021 г.

---

Департамент физики, Индийский технологический институт, Патна, кампус Бихта, Патна, Бихар, Индия-801106; e-mail: adityadey51196@gmail.com.