

Національна академія наук України
Міністерство освіти та науки України
Наукова рада з проблеми «Фізика напівпровідників
і діелектриків» при Відділенні фізики і астрономії
Національної академії наук України
Українське фізичне товариство
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
Ужгородський національний університет
Інститут електронної фізики НАН України

*Конференція присвячена 120-річчю
з дня народження академіка Лашкарьова В.Є. і
100-річчю з дня народження проф. Чепура Д.В.*

**ІХ УКРАЇНСЬКА НАУКОВА
КОНФЕРЕНЦІЯ З ФІЗИКИ
НАПІВПРОВІДНИКІВ
УНКФН-9**

**IX UKRAINIAN SCIENTIFIC
CONFERENCE ON PHYSICS
OF SEMICONDUCTORS
(USCPS-9)**

**ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ
ABSTRACTS**

Ужгород, Україна
22 - 26 травня 2023

Uzhhorod, Ukraine
May 22-26, 2023

УДК 537.311.322(063)

П 26

9-та Українська наукова конференція з фізики напівпровідників. Матеріали конференції. – Ужгород: ТОВ "РІК-У", 2023. – 396 с.

Дана збірка містить тези доповідей 9-ї Української наукової конференції з фізики напівпровідників (УНКФН-9) за участі зарубіжних науковців. Матеріали відображають зміст доповідей конференції, у яких викладені нові результати, стан і перспективи досліджень в області фізики напівпровідників за основними напрямками: нові фізичні явища в об'ємі та на поверхні напівпровідників, фізичні явища у низькорозмірних структурах, фізика напівпровідникових приладів, проблемні питання мікро- та наноелектроніки, сучасні фізико-технічні аспекти напівпровідникової сенсорики та оптоелектроніки, надвисокочастотна та терагерцова електроніка, матеріалознавство, технології та діагностика напівпровідникових матеріалів.

У збірці надруковані тези пленарних, запрошених, усних та стендових секційних доповідей. Більша частина відповідних повних доповідей за рекомендацією програмного комітету і редакційної колегії конференції буде опублікована в тематичних випусках наукових журналів: "Український фізичний журнал", "Журнал фізичних досліджень", "Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics", "Функціональні матеріали", "Технология и конструирование в электронной аппаратуре", "Фотоелектроніка", "Сенсорна електроніка і мікросистемні технології".

УДК 537.311.322(063)

Видання тез доповідей здійснено з авторських оригіналів, підготовлених до друку Програмним комітетом і редакційною колегією конференції.

Рекомендовано до друку Вченою радою Інституту фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України (протокол № 8 від 3 травня 2023 р.).

Редакційна колегія:

Головний редактор О.Є. Беляєв

Члени редколегії:

В.О. Кочелап

О.В. Стронський

С.М. Левицький

Р.А. Редько

В.І. Смоланка

В.М. Міца

ISBN 978-617-8276-25-6

© ТОВ "РІК-У", 2023

© Інститут фізики напівпровідників
ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, 2023

© Ужгородський національний університет, 2023

Model phonon spectra and densities of states of crystals Mo₃Ge, Nb₃Ge and V₃Ge

I.I. Nebola¹, A.F. Katanytsia¹, D.I. Kaynts¹, Yu.I. Tjagur¹, I.M. Shkyrta², M.M. Pop¹.

¹*Uzhhorod National University, 3, Narodna Sq., 88000 Uzhhorod, Ukraine*



²*Mukachevo State University, 26, Uzhhorodska str., 89600 Mukachevo, Ukraine*

E-mail: ivan.nebola@uzhnu.edu.ua

The effectiveness of the combination of the concept of superspace symmetry [1,2] and ideas of the lattice model [3] for calculation of model phonon spectra of complex crystal formations [4-6] has been shown. (3+3)-dimensional bases, sets of modulation vectors, modulation functions, generalized dynamic matrices and (4a×4a×4a) lattice model for describing the crystal structure and calculations of model phonon spectra and densities of states of Mo₃Ge, Nb₃Ge and V₃Ge structures for various combinations of force constants have been presented.

Representatives of the A-15 family are interesting as the most high-temperature superconductors. The progenitor of this family is aluminum niobium Nb₃Al [7], a typical superconductor with the structure A-15 (cubic structure of type β-W with the space group Pm3n No. 200. The simple cubic unit cell contains 8 atoms in the positions ([0,0,0], [1/2,1/2,1/2],[x,1/2,0],[-x,1/2,0],[0,x,1/2],[0,-x,1/2],[1/2,0,x],[1/2,0,-x]) where x=1/4. It is convenient to set all these positions in the lattice model of order 64. For their generation the (3+3)-dimensional direct and inverse bases were used [4-6]:

The calculated model phonon spectra and densities of states of the indicated representatives of this family with using the methodology [1, 4-6] are illustrated in Fig. 1.

| | | | |
|---|--|--|---|
| | | |  |
| Mo ₆ Ge ₂ (95.94,72.6) powerConstants: = Vector[row](10, [0, 0, 0, 10.9.10,01.10, 9, 0, 0, 0]) | | Mo ₆ Ge ₂ (95.94,72.6), powerConstants: = Vector[row](10, [0, 0, 0, 60.9.1,0.1,05, 0, 0, 0]), | |
| | | |  |
| Nb ₆ Ge ₂ (92,9,72.6). powerConstants: = Vector[row](10, [0, 0, 0, 10.9.10,01.10, 9, 0, 0, 0]) | | Nb ₆ Ge ₂ (92,9,72.6). powerConstants: = Vector[row](10, [0, 0, 0, 60.9.1,0.1,05, 0, 0, 0]) | |


| | | | |
|--|--|---|---|
| | | |  |
| V ₆ Ge ₂ (50.9,72.6) powerConstants: = Vector[row](10, [0, 0, 0, 10.9,10,01.10, 9, 0, 0, 0]) | | V ₆ Ge ₂ (50.9,72.6) powerConstants: = Vector[row](10, [0, 0, 0, 60.9,1,0.1,05, 0, 0, 0]) | |

Fig. 1. Model phonon dispersion dependences and densities of phonon states of Mo₃Ge, Nb₃Sn and V₃Ge crystals calculated for highly symmetric directions of the Brillouin zone in schemes with different combinations of force constant values.

The values of the force constants α_l are given in order of increasing the distance between the orbital positions 1(0,0,0) and 1+1, while all possible variants of the distances between pairs of positions occupied by atoms were taken into account. The force constants were chosen in the equidistant approximation. For example, for the Nb₃Sn structure, the power constant α_4 , which describes the interaction at a distance of $2a$, is equal to 10.9 n/m, and all others are equal, respectively, to (powerConstants: = Vector[row](10,[0,0,0,10.9,10,01.10,9,0,0,0])). Two identical combinations of force constants were chosen for all the investigated crystals.

The resulting model calculations reflect the modification of phonon spectra exclusively depending on the mass characteristics of metal atoms. It is shown that by choosing the certain combinations of force constant values, mainly α_4 , α_5 and α_6 , it is possible to obtain phonon spectra with optical frequencies within the range of 150 to 240 cm⁻¹ (for Nb₃Sn crystals, it correlates with the experimental data [7]). At the same time, the distribution of densities of phonon states is significantly different. We note the proximity of the ranges of high-frequency optical branches for a number of crystals and significant difference in the values for low-frequency and especially acoustic branches.

1. P. M. de Wolff, T. Janssen, J.Aloysio, *Acta crystallographica. Section A*, 37, 5, 625–636 (1981).
2. S. van Smaalen, *Zeitschrift für Kristallographie*, 219, 681–691 (2004).
3. S.A. Andersson and M.D. Perlman, *The Annals of Statistics*, 21,3.1318–1358 (1993).
4. T. Janssen, *J.Phys.C:Solid State Phys.*,12, 24, 5381–5392 (1979).
5. I.I. Nebola, A.Ya.Shteyfan, V.I. Sidey, A.F. Katanytsia, I.P. Studenyak, I.M. Shkyrta. *SPQEO*, 21, 134- 138 (2018).
6. <https://maple.cloud/app/5753562177994752/Modeling+of+dispersions+of+phonon+spectra>
7. F. Weiss, O. Demolliens, R. Madar, J. P. Senateur and R. Fruchart, *J. Phys. France*, vol. 45, pp. 1137-1141 (1984).