РАСЧЕТ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ β-GA2O3 С ДЕФЕКТАМИ

А.В. Степанов 1 \*), Д.И. Тетельбаум 2), Е.В. Окулич 2), А. С. Сабиров3)

1) Чувашский государственный аграрный университет, Чебоксары, Россия

2) Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

3) Чувашский государственный университет им. И. Н. Ульянова, Чебоксары, Россия

\*) e-mail: for.antonstep@gmail.com

Оксид галлия Ga2O3 (широкозонный полупроводник) - один из наиболее перспективных материалов для электроники нового поколения. Однако его широкому использованию препятствуют нерешенные проблемы, связанные с неконтролируемым внесением дефектов и примесей, определяющих его работоспособность, отсутствие надежных методов получения низкоомного материала с проводимостью p-типа и отсутствие знаний о связь дефектного и примесного состава с электронной структурой и свойствами Ga2O3.

Целью данной работы является исследование зонной структуры оксида галлия с дефектами. Рассчитаны вакансии галлия (VGaI, VGaII) и кислорода (VOI, VOII, VOIII).

По данным расчетов было установлено, что энергии уровней, рассчитанные на сетке k (2 × 2 × 2) и k (4 × 4 × 4), которые вместе с гибридным функционалом HSE06 (0,32, 0,20) , наиболее близки к экспериментальным данным. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [1].

ЛИТЕРАТУРА

1. Vl. Voevodin, et al. Supercomputing Frontiers and Innovations, Vol.6, No.2 (2019). pp.4–11. DOI:10.14529/jsfi190201