

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ БЕТА МОДИФИКАЦИИ
ОКСИДА ГАЛЛИЯ МЕТОДАМИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ****Черноок Е.К.¹** (аспирант)**Научный руководитель — к.ф.-м.н. Рожков М.А.**¹Университет ИТМО

egor.chernook@yandex.ru

Введение. Оксид галлия (β -Ga₂O₃) — перспективный материал с широкой запрещённой зоной и уникальными оптическими и электрическими свойствами. Дефекты кристаллической структуры способны оказывать влияние на характеристики материала. В недавних исследованиях [1-3] было продемонстрировано воздействие вакансий на плотность состояний в кристаллах, а также на их структурные и оптические свойства. Исследования методом первопринципных расчётов направлены на описание влияния точечных дефектов. Исследования [1-5] представляют параметры моделирования и демонстрируют расхождения в значениях энергии образования вакансий. Для понимания свойств проводимости, оптики и стабильности устройств на основе оксида галлия (β -Ga₂O₃) необходимо исследовать энергию кислородных вакансий. Целью нашего исследования было определить наиболее оптимальные параметры моделирования и сравнить энергию формирования кислородных вакансий с существующими работами.

Основная часть. В ходе работы было выполнено моделирование кристалла бета модификации оксида галлия, трёх кристаллов бета модификации оксида галлия с вакансиями кислорода, образованными неэквивалентными атомными позициями; кристалла галлия и кристалла альфа модификации кислорода. Моделирование проводилось методами теории функционала плотности с использованием GGA функционала и псевдопотенциалов SSSP PBEsol Precision v1.3.0 [6], включающих в валентную зону внутренние 3d-электроны галлия, что позволяет корректно воспроизводить ширину запрещённой зоны оксида галлия (β -Ga₂O₃) без учёта поправок Хаббарда. Моделирование чистой системы проводилось на конвенциональной ячейке (20 атомов). Моделирование кристаллов с вакансиями проводилось на суперячейке размерами 2x2x2 (160 атомов) полученной трансляцией конвенциональной ячейки.

Выводы. В ходе работы установлена оптимальная последовательность расчётов, облегчающая сходимость и позволяющая получать зонную структуру. На основе результатов численных экспериментов были получены энергии формирования вакансий кислорода и проведено сравнение с другими работами по данной теме.

Литература

1. Dong L. et al. Effects of oxygen vacancies on the structural and optical properties of β -Ga₂O₃ / L. Dong, [и др.] // Scientific Reports. – 2017. – Т. 7. – С. 40160. – DOI: 10.1038/srep40160
2. McCluskey M. D. Point defects in Ga₂O₃ / M. D. McCluskey // Journal of Applied Physics. – 2020. – Т. 127, № 10. – С. 101101. – DOI: 10.1063/1.5086398
3. Usseinov A. B. Vacancy Defects in Ga₂O₃: First-Principles Calculations of Electronic Structure / A. B. Usseinov, [и др.] // Materials. – 2021. – Т. 14. – С. 7384. – DOI: 10.3390/ma14237384
4. Usseinov A. B. Ab-Initio Calculations of Oxygen Vacancy in Ga₂O₃ Crystals / A. B. Usseinov, [и др.] // Latvian Journal of Physics and Technical Sciences. – 2021. – Т. 58. – С. 3-10. – DOI: 10.2478/lpts-2021-0007

5. Varley J. Oxygen vacancies and donor impurities in β -Ga₂O₃ / J. Varley, [и др.] // Applied Physics Letters. – 2010. – Т. 97. – С. 142106. – DOI: 10.1063/1.3499306
6. Prandini G. Precision and efficiency in solid-state pseudopotential calculations / G. Prandini, [и др.] // npj Computational Materials. – 2018. – Т. 4, № 1. – С. 72. – DOI: 10.1038/s41524-018-0127-2