

## **Ir PIEMAIŠĪJUMU GALLIJA OKSĪDĀ APRĒĶINI NO PIRMAJĪEM PRINCIPIEM.**

Aleksandrs Začinskis, Aleksandrs Platonenko, Dmitrijs Bočarovs,  
Anatolijs Popovs, Sergejs Piskunovs, Juris Purāns

*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Pēdējā laikā gallija oksīds ( $\text{Ga}_2\text{O}_3$ ) ir pievērsis lielu uzmanību pateicoties ārkārtīgi daudzsoļojām elektroniskajām īpašībām augstās jaudas elektronikā. Tā, ka gallija oksīds ir pusvadītājs ar plašo aizliegto zonu un augstu termisko un ķīmisko stabilitāti, to potenciāli var izmantot ultravioletā (UV) optoelektronikā, lauktranzistoros, Šotkija diodēs un citās elektroniskajās ierīcēs. Viena no izplatītākajām  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  kristālu audzēšanas metodēm ir Čohralska metode, kurā gallijā oksīda pulveri izkausē irīdija (Ir) tīģelī. Rezultātā ar Čohralska metodi izaudzētie  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  kristāli parasti satur irīdija piemaisījumus. Šajā pētījumā mēs paveicām Ir dopantu elektronisko īpašību  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  korunda-tipa ( $\alpha$ ) un monoklīnu ( $\beta$ ) fāzēs aprēķinus no pirmajiem principiem, kas tika veikti, izmantojot CRYSTAL17 programmu un atomu orbitāļu lineārās kombinācijas (LCAO) metodi.

Lai modelētu Ir piemaisījumus gallija oksīdā, tika izmantots hibrīdais apmaiņas-korelācijas HSE06 funkcionālis un superšūnu pieeja. Šajā pētījumā tika aprēķināti elektroniskā struktūrā, Ir atomu iekļaušanas enerģija un strukturālās īpašības. Iegūtie rezultāti ļauj mums labāk izprast Ir dopēšanas ietekmi uz  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  un izmantot to iespējamajos pielietojumos.

Autori pateicas ERAF projektam no. 1.1.1.1/20/A/057 par finansiālu atbalstu pētniecībā.

## **FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS OF Ir IMPURITIES IN GALLIUM OXIDE**

Aleksandrs Zacinskis, Alexander Platonenko, Dmitry Bocharov,  
Anatoli I. Popov, Sergei Piskunov, Juris Purans

*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Recently, gallium oxide ( $\text{Ga}_2\text{O}_3$ ) has brought a lot of attention for its extremely promising electronic properties for high-power electronics. Being a wide-bandgap semiconductor with high thermal and chemical stability, gallium oxide has potential applications in ultraviolet (UV) optoelectronics, field-effect transistors, Schottky barrier diodes, and other electronic devices. One of the most common methods of growing bulk  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  crystals is Czochralski (CZ) method, in which gallium oxide powder is melted in an iridium (Ir) crucible. As a result, CZ-grown  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  crystals typically contain Iridium impurities. In this study, we present *ab initio* calculations of electronic properties of Ir incorporations in corundum ( $\alpha$ ) and monoclinic ( $\beta$ ) phases of  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  performed using CRYSTAL17 code using Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO) method.

Hybrid exchange–correlation functional HSE06 and supercell approach were used to simulate Ir impurities in gallium oxide. The electronic structure, incorporation energies of Ir atoms and structural properties were calculated in framework of this study. Obtained results allow us to understand the effect of Ir doping in  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  deeper and utilize it in possible applications.

Financial support was provided by ERDF Project no. 1.1.1.1/20/A/057.