

(Ir,Ga)₂O₃ cieto šķīdumu elektroniskās struktūras ab initio pētījums

Jurijs Grečenkovs¹, Dmitrijs Bočarovs¹, Sergejs Piskunovs¹
¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Ga₂O₃ ir materiāls ar daudzsoļām īpašībām pielietošanai energoelektronikā, pateicoties lielam aizliegtas zonas platumam. Viens no šī materiāla heteroepitaksijas progresu kavējošajiem šķēršļiem ir nespēja iegūt piemērotu p-tipa dopingū. Nesen (Ir,Ga)₂O₃ cietais šķīdums tika pētīts kā viens no iespējamiem risinājumiem, lai sasniegtu p-tipa legēto ekvivalentu priekš n-tipa Ga₂O₃.

Šajā darbā tiek pētīti α -fāzes (Ir,Ga)₂O₃ cietie šķīdumi dažādās Ir/Ga attiecībās, izmantojot ab initio metodes. Tiek prezentētas un analizētas strukturālās un elektroniskās īpašības. Rezultāti norāda uz nelineāras joslas spraugas samazināšanos, palielinoties irīdija koncentrācijai. Šis novērojums ir izskaidrojams ar jauktā materiāla zonas struktūru, kurā galvenā loma ir Irīdija orbitālajām vadītspējas joslām. Šis fakts norāda tikai uz nelielu izmantojamo Ir koncentrāciju logu, un tam ir ietekme, kas jāņem vērā attiecībā uz (Ir, Ga)₂O₃ pielietojamību.

Ab initio study of electronic structure in (Ir,Ga)₂O₃ solid solutions

Jurij Grechenkov¹, Dmitry Bocharov¹, Sergei Piskunov¹
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Ga₂O₃ is a material with promising properties for power electronics application due to its large band gap value. One of the progress stifling obstacles for heteroepitaxy of this material is the inability of obtaining suitable p-type doping. Recently, (Ir,Ga)₂O₃ solid solutions were studied as one of the possible measures for achieving the p-type doped counterpart for the n-type Ga₂O₃.

In this work we examine the α -phase (Ir,Ga)₂O₃ solid solutions at different Ir/Ga ratios using ab initio methods. Structural and electronic properties are presented and analyzed. Evidence points to a non-linear band gap narrowing with increase of Iridium concentration. This observation is explained by the band structure of the mixed material with the Iridium orbital formed conduction bands playing a major role. This finding points to only a small window of usable Ir concentrations and has implications to be taken in consideration for the applicability (Ir,Ga)₂O₃.

This research is funded by the Latvian Council of Science grant No. LZP-2021/1-0322