

Физика конденсированного состояния

Научная статья

УДК 538.915

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17301>

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА НАНОКРИСТАЛЛОВ ОКСИДА ГАЛЛИЯ, ЛЕГИРОВАННЫХ МЕЛКИМИ ДОНОРАМИ

А. А. Ревин, А. А. Конаков, Д. С. Королев ✉

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,

г. Нижний Новгород, Россия

✉ dmkorolev@phys.unn.ru

Аннотация. Приведены результаты теоретических расчетов электронных состояний нанокристаллов оксида галлия (Ga_2O_3) как легированных донорной примесью, так и нелегированных. Определены структура, состояния и энергетические уровни размерного квантования в нанокристаллах в приближении огибающей функции. Согласно расчетам, электронно-дырочная пара образует в нанокристалле связанное состояние экситонного типа. Показано, что типичные донорные примеси в Ga_2O_3 , такие как кремний и олово, создают в запрещенной зоне состояния, локализованные в пространственной области, в несколько раз меньшей объема нанокристалла. Образуют компактную нейтральную пару, электрон и донорный ион не оказывают какого-либо заметного влияния на состояния оптически возбужденных электронно-дырочных пар. Обсуждается также влияние внедрения примеси на рекомбинационные процессы.

Ключевые слова: нанокристалл, оксид галлия, электронная структура, донорная примесь, квантово-размерный эффект

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-10233, <https://rscf.ru/project/21-79-10233/>.

Для цитирования: Ревин А. А., Конаков А. А., Королев Д. С. Электронная структура нанокристаллов оксида галлия, легированных мелкими донорами // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 7–16. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17301>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17301>

THE ELECTRONIC STRUCTURE OF GALLIUM OXIDE NANOCRYSTALS DOPED WITH SHALLOW DONORS

A. A. Revin, A. A. Konakov, D. S. Korolev ✉

National Research Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod,

Nizhni Novgorod, Russia

✉ dmkorolev@phys.unn.ru

Abstract. The results of theoretical calculations of electronic states of the gallium oxide (Ga_2O_3) nanocrystals both doped with donor impurity and undoped have been presented in the paper. In the envelope function approximation, the structure, states and energy levels of size quantization in the nanocrystals were determined. According to our calculations, the electron-hole pair forms a bound state of the exciton type in the nanocrystal. The typical donor

impurities in Ga_2O_3 , such as silicon and tin, were shown to create bandgap states localized in a spatial domain being several times smaller than the nanocrystal's volume. Forming a compact neutral pair, the electron and donor ions have no noticeable influence on the states of the optically excited electron-hole pairs. The effect of impurity implantation on recombination processes was also discussed.

Keywords: nanocrystal, gallium oxide, electronic structure, donor impurity, quantum size effect

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 21-79-10233, <https://rscf.ru/project/21-79-10233/>).

For citation: Revin A. A., Konakov A. A., Korolev D. S., The electronic structure of gallium oxide nanocrystals doped with shallow donors, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 7–16. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17301>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Широкозонные полупроводники рассматриваются в качестве наиболее перспективных для применения в электронике. В последнее время все большую популярность приобретает оксид галлия – полупроводниковый материал, рассматриваемый в качестве базового для устройств электроники четвертого поколения. Благодаря его характеристикам, в первую очередь достаточно большой ширине запрещенной зоны, составляющей около 4,5–5,2 эВ, оксид галлия – один из лучших материалов для создания устройств силовой электроники, детекторов УФ-излучения, газовых сенсоров и т. п. [1–3]. Еще одно важное преимущество, которым обладает оксид галлия, – это наличие технологии получения монокристаллических подложек большого диаметра.

К настоящему времени наблюдается устойчивый рост количества публикаций, посвященных разработке и изучению способов получения материалов на основе оксида галлия (выращивание монокристаллов, эпитаксия и нанесение тонких пленок), модификации его свойств и потенциальным применениям в приборных структурах [4–6]. Наряду с экспериментальными, растет и число теоретических работ, посвященных исследованию зонной структуры, электронных состояний и параметров дефектных уровней для объемного оксида галлия [7–9].

Одним из актуальных направлений развития технологии материалов на основе оксида галлия является создание наноструктур. Перспектива их практического применения связана, в первую очередь, с возможностью создания светоизлучающих и фотоприемных устройств на их основе [10, 11]. Однако широкое применение ограничено тем, что в качестве основных для получения наноструктур служат методы химического синтеза, не совместимые с микроэлектронной технологией.

Преодолеть это ограничение позволяет использование методики ионно-лучевого синтеза нанокристаллов (NC) Ga_2O_3 в диэлектрических матрицах (например, оксиды кремния или алюминия) на кремниевых подложках [12]. Преимуществом ионного синтеза, кроме его полной совместимости с кремниевой технологией, является возможность легирования материала примесными атомами, что позволяет контролируемо модифицировать свойства синтезированных образцов. Несмотря на интенсификацию экспериментальных исследований в этой области, теоретические работы по изучению наноструктур оксида галлия практически отсутствуют.

Структуры с нанокристаллами оксида галлия обладают интенсивной люминесценцией в УФ- и голубой областях спектра, что можно использовать как при создании светодиодных структур, так и для преобразования УФ-излучения в видимое [13, 14]. При этом спектры фотолюминесценции таких наноструктур отличаются от спектров излучения объемных образцов Ga_2O_3 . Однако объяснение наблюдаемых закономерностей, в частности учет квантоворазмерного эффекта в люминесценции наночастиц, на настоящий

момент носит исключительно качественный характер [15]. Также совершенно неизученным остается вопрос о влиянии легирования мелкими донорами на зонную структуру и электронные состояния НС Ga₂O₃.

В настоящей работе проведено теоретическое исследование электронной структуры нанокристаллов оксида галлия без допирующих примесей, а также нанокристаллов, легированных мелкой донорной примесью.

Электронная структура нанокристаллов оксида галлия без примесей (в нулевом приближении)

Для изучения влияния мелких доноров на структуру состояний квазичастиц в НС целесообразно рассмотреть потенциал примеси как возмущение, поэтому стоит сначала кратко описать структуру состояний электронов и дырок в чистом НС Ga₂O₃.

Задача размерного квантования электронов и дырок в оксиде галлия решалась в приближении огибающей функции. Уравнение для определения собственных функций и собственных значений имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) F(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где m_x, m_y, m_z – составляющие анизотропной эффективной массы электрона или дырки; E – энергия; $F(\mathbf{r})$ – огибающая функция; потенциал $U(\mathbf{r})$ предполагается центральным.

Будем считать, что $U(\mathbf{r})$ – сферическая яма конечной глубины (рис. 1). Величина разрыва зон проводимости составляет около 3 эВ, валентных зон – примерно 1 эВ [4]. Пренебрегаем также анизотропией эффективных масс [16]: для электронов учет анизотропии масс дает поправки за пределами точности расчетов, для дырок величина поправок имеет несколько большую величину, но все равно остается малой.

Тогда решение уравнения (1) получаем в следующем виде:

$$\begin{aligned} \psi_{klm} &= A \frac{j_l(kr)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad \text{при } r < R, \\ \psi_{klm} &= B \frac{h_l(i\kappa r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad \text{при } r > R, \end{aligned} \quad (2)$$

где r – радиус нанокристалла; $k^2 = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}$; $\kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$; $j_l(kr)$ – сферические функции Бесселя; $h_l(i\kappa r)$ – функции Ханкеля мнимого аргумента.

Неопределенные константы находятся из условия нормировки и непрерывности волновой функции. Энергетический спектр НС Ga₂O₃ находится из условия непрерывности логарифмической производной.

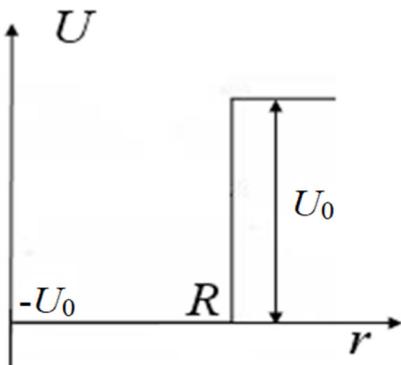


Рис. 1. Вид потенциала сферической ямы (R – ее радиус) конечной глубины U_0

На рис. 2 приведены графики зависимости энергий основного ($1s$) состояния электрона проводимости и дырки, отсчитываемых от дна зоны проводимости (вверх) и потолка валентной зоны (вниз), соответственно.

Анализ графиков позволяет заключить, что полученные значения энергий основных уровней размерного квантования слабо отличаются от уровней энергий бесконечной сферической ямы, поэтому далее для расчетов в качестве волновых функций основных и низколежащих возбужденных состояний можно использовать волновые функции бесконечной сферической ямы. Стоит отметить, что для такого приближения гораздо важнее близость волновых функций, чем энергий.

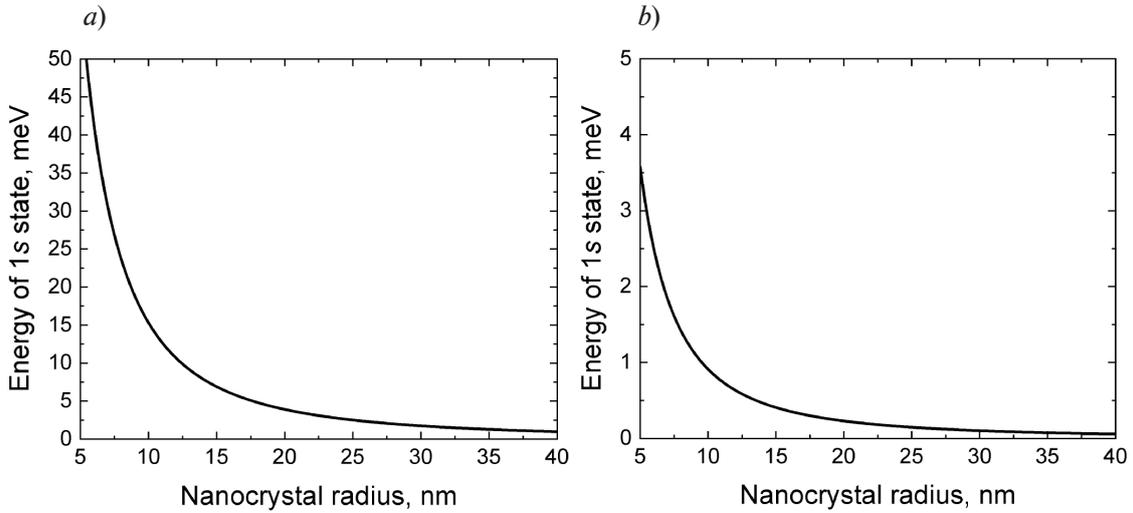


Рис. 2. Зависимости энергий 1s-состояния электрона (a) и дырки (b) от радиуса NC $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$

На рис. 3 изображены радиальные плотности, задаваемые волновыми функциями основного состояния, для конечной и бесконечной ямы. Видно, что волновые функции всюду близки и использование функций бесконечной ямы вполне оправдано.

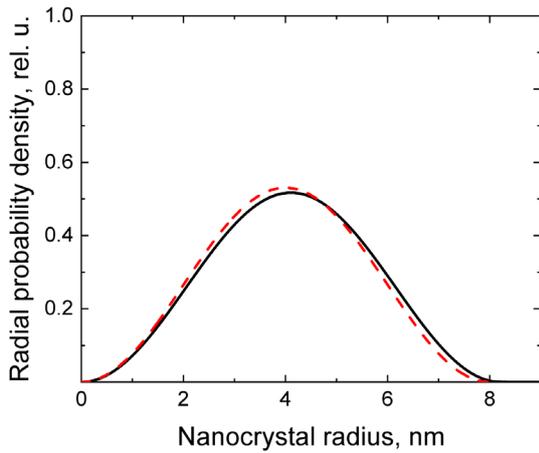


Рис. 3. Сравнение радиальных плотностей вероятности $r^2|\psi|^2$ для сферических ям конечного (сплошная линия) и бесконечного (пунктир) значений глубины.

Плотность выражена в «естественных» для конечной ямы единицах (rel. u.): $k_0 = \sqrt{2mU_0/\hbar^2}$

Оператор кулоновского взаимодействия \hat{V} в координатном представлении имеет вид

$$\hat{V} = -\frac{e^2}{\epsilon_s |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}, \quad (4)$$

где \mathbf{r}_e , \mathbf{r}_h – радиусы-векторы электрона и дырки, соответственно; ϵ_s – статическая диэлектрическая проницаемость.

Зависимость энергии кулоновского взаимодействия от радиуса нанокристалла приведена на рис. 4. Как видно из графика, величина прямого кулоновского взаимодействия электрона и дырки сопоставима с энергиями размерного квантования, получаемыми из рассматриваемых независимо уравнений типа (1). Это говорит о том, что разделения

Разделение системы уравнений для дырок и электронов на два независимых уравнения типа (1) не всегда оправдано (см., например, статью [17]); в общем случае дырка и электрон влияют на состояния друг друга и необходимо решать систему уравнений, которые не разделяются на независимые уравнения для электрона и дырки.

Оценим по теории возмущений энергию взаимодействия частиц, находящихся в состояниях (2). Такая оценка позволит установить, можно ли считать их состояния независимыми. Очевидно, что эта энергия будет диагональным матричным элементом кулоновского взаимодействия:

$$E = \langle 1s_e 1s_h | \hat{V} | 1s_e 1s_h \rangle, \quad (3)$$

где $|1s_e 1s_h\rangle$ – вектор основного состояния системы электрона и дырки.

Соответствующая этому вектору волновая функция равна произведению волновых функций основного состояния дырки и электрона.

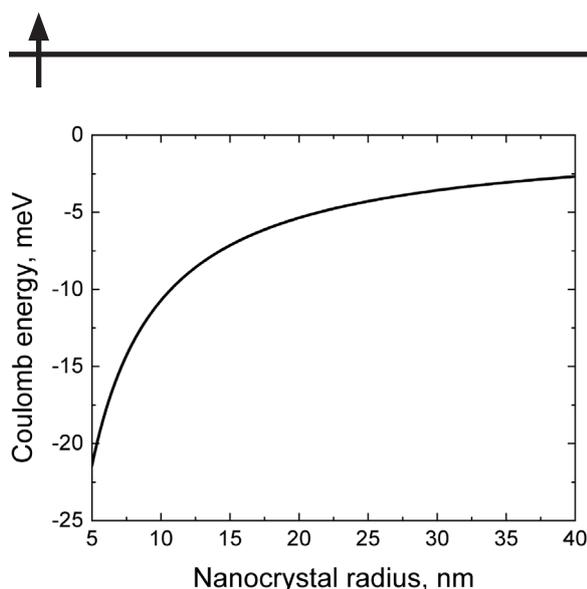


Рис. 4. Зависимость энергии кулоновского взаимодействия дырки и электрона от радиуса нанокристалла

зон. Последний факт говорит о том, что, по всей видимости, необходимо использовать многозонную модель для исследования дырочных состояний. Однако эти вопросы требуют отдельного рассмотрения и выходят за рамки данной статьи.

Электронная структура примесных атомов в нановключениях оксида галлия

Для объемных материалов характерно четкое разделение дефектов на мелкие и глубокие. Это разделение в первую очередь происходит по степени локализации потенциала, который создает этот дефект. Потенциал глубоких центров сильно локализован и действует в области одной элементарной ячейки. Мелкие дефекты, хотя и могут иметь часть потенциала, которая ограничена элементарной ячейкой (так называемый потенциал центральной ячейки [18]), но также всегда имеют и дальнедействующую кулоновскую часть потенциала, поэтому их часто называют кулоновскими центрами. Отсюда следует, что глубокие дефекты почти не меняют структуры создаваемых ими состояний в наноразмерных системах, так как они не «чувствуют» границ НС. В то же время состояния мелких дефектов могут сильно изменяться. Радиусы дискретных локализованных электронных состояний, которые они создают в объемном материале, могут быть порядка или даже больше размеров нановключений, т. е. границы НС, которые создают потенциал конфайнмента, неизбежно следует включать в задачу. В связи с этим нахождение состояний для мелких доноров в НС представляет собой гораздо более важную задачу, чем для глубоких центров.

Рассмотрим, как влияет добавление примесных атомов на электронный и дырочный спектры нанокристаллов оксида галлия. В приближении огибающей функции, при наличии мелкого донора, гамильтониан в уравнении (1) принимает следующий вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, \mathbf{h}), \quad (5)$$

где m – эффективная масса электрона или дырки в изотропном приближении, $U(\mathbf{r})$ – потенциал сферической ямы, $V(\mathbf{r}, \mathbf{h})$ – потенциал донора, который зависит от положения донора в точке с радиусом-вектором \mathbf{h} .

Потенциал примеси содержит два слагаемых:

$$V = V_C + W(\mathbf{r}), \quad (6)$$

где $W(\mathbf{r})$ – короткодействующий потенциал центральной ячейки, зависящий от ближайшего окружения донора; V_C – кулоновская часть потенциала, $V_C = \frac{e_0^2}{\epsilon_s r}$.

Короткодействующий потенциал можно рассчитать, используя диэлектрическую функцию, либо учесть феноменологически, зная положения примесных уровней в объемном материале. В настоящее время информация об уровнях различных донорных примесей довольно неоднозначна. Для кремния [19] можно предположить, что в большинстве случаев уровень слабо отличается от водородоподобного, который имеет значение около 27 мэВ. Для олова же, по разным данным, положение уровня может изменяться от 16 мэВ [20] до 60 мэВ [21], причем концентрации доноров практически равны ($9 \cdot 10^{17}$ и $7 \cdot 10^{17}$ см⁻³, соответственно). Уменьшение энергии донорного уровня по сравнению с водородоподобным связано с делокализацией электрона, ввиду изменения диэлектрической проницаемости или влияния соседних примесей; повышение энергии уровня обычно связано с сильным потенциалом центральной ячейки. Сложность теоретического анализа возникает из-за того, что эти случаи реализуются при почти равных концентрациях. Поэтому в первом приближении пренебрежем потенциалом центральной ячейки и рассчитаем структуру водородоподобного донора.

Вычислим поправку к энергии основного состояния электрона и дырки по теории возмущений, где потенциал возмущения имеет следующий вид:

$$V_C = \pm \frac{e_0^2}{\epsilon_s |\mathbf{r} - \mathbf{h}|}, \quad (7)$$

где \mathbf{h} – радиус-вектор примесного атома.

Знак плюс берется для дырок, так как донор заряжен положительно и дырка отталкивает, знак минус берется для электронов.

Для расчетов были выбраны следующие параметры: радиус нанокристалла $R = 10$ нм, а в качестве волновых функций, по указанным выше причинам, использовались функции бесконечной ямы, и невозмущенные энергии имели значения $E_{1se} \approx 13$ мэВ и $E_{1sh} \approx 1$ мэВ. Графики зависимости поправок к энергии первого порядка для электронов и дырок приведены на рис. 5.

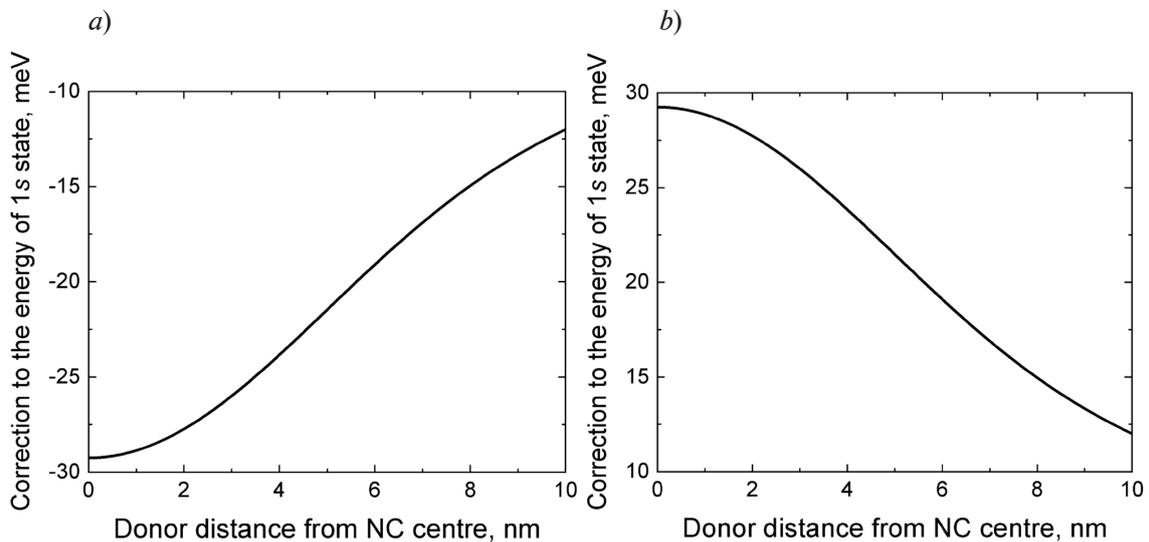


Рис. 5. Зависимости поправок к энергии основного состояния электронов (a) и дырок (b) от положения донора в нанокристалле (NC) (первый порядок теории возмущений)

Из графиков видно, что поправка первого порядка к основному состоянию не является малой величиной, по сравнению с энергией основного состояния, вне зависимости от позиции донора в нанокристалле. Отсюда следует, что потенциал донора нельзя считать малым и это необходимо учитывать конечной суммой ряда теории возмущений. Следовательно, необходимо использовать иной метод расчета спектра.

Подходящим методом расчета энергетических уровней электронов и дырок является вариационный метод Рэлея – Ритца [22]. Стоит отметить, что иные величины, для расчета которых используется волновая функция, могут получаться далекими от действительности, хотя в этом приближении энергетические уровни рассчитываются довольно точно.

Рассмотрим сначала случай донора в центре нанокристалла. По всей видимости, исходя из данных на рис. 5, в этом случае он будет больше всего влиять на электронную структуру. В качестве пробной для основного состояния электрона естественно выбрать функцию, которая будет «похожа» одновременно на функцию сферической ямы и функцию атома водорода. Поэтому пробную волновую функцию выберем в следующем виде:

$$\psi_e = A \frac{\sin \frac{\pi \cdot r}{R}}{r} \exp(-\alpha r), \quad (8)$$

где α , A – константы, при этом α – вариационный параметр; A – константа нормировки.

На рис. 6 показано радиальное распределение уровня энергии основного состояния электрона в нанокристалле с примесным кулоновским донором.

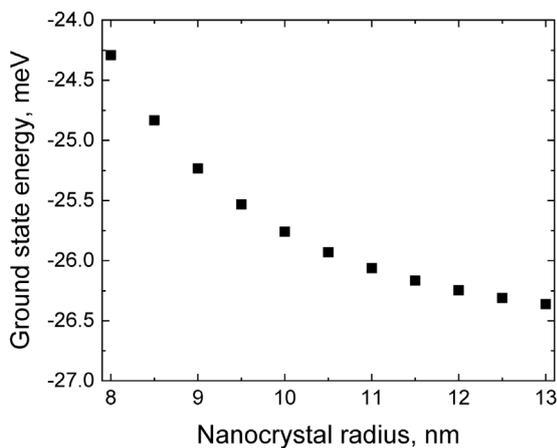


Рис. 6. Радиальная зависимость энергии основного уровня электрона в нанокристалле с примесным кулоновским центром (донором)

Из графика видно, что донорные уровни легированного нанокристалла в случае водородоподобного потенциала слабо отличаются от донорных уровней объемного материала; при этом «радиус» волновой функции $\alpha^{-1} \sim 1$ нм, т. е. донор, как и в объемном материале, образует нейтральную систему довольно малого радиуса, которая почти не будет влиять на оптически возбужденную электронно-дырочную пару. Это следует из сосредоточения плотностей дырки и электрона в состояниях (2) в сферическом слое, радиус которого примерно равен половине радиуса нанокристалла (см. рис. 3), а система, включающая донорный электрон и ион, имеет «эффективный радиус действия» $\alpha \sim 1$ нм. Такой результат позволяет утверждать, что в легированном нанокристалле оксида галлия оптически возбужденная электронно-дырочная пара ведет себя так, как в нанокристалле без допирующей примеси, и ширина оптической щели практически не зависит от легирования нанокристалла.

Важным отличием легированного нанокристалла от нелегированного является присутствие «лишнего» электрона, который имеет высокую (порядка ширины запрещенной зоны) энергию объемного материала уже в основном состоянии, а это значит, что после оптического возбуждения электронно-дырочной пары появляется дополнительный канал рекомбинации, связанный с Оже-процессом. Оже-рекомбинация может играть важную практическую роль в случае применения структур с нанокристаллами оксида галлия при разработке детекторов ультрафиолетового диапазона. Это следует из того, что в нелегированном нанокристалле электрон всегда находится в локализованном состоянии. Ввиду того, что его волновая функция слабо отличается от функции бесконечной ямы, вероятность перескока электрона между нанокристаллами стремится к нулю, т. е. в массивах нанокристаллов, не содержащих примеси, протекание фототока маловероятно.

В противоположность этому, в процессе Оже-рекомбинации электрон может попасть в область непрерывного спектра между уровнем вакуума и дном зоны проводимости диэлектрической матрицы. В этой области энергий волновая функция электрона делокализована и он может успешно перемещаться по всему массиву нанокристаллов, что повлечет за собой возникновение фототока.

Заключение

В настоящей работе была исследована электронная структура нанокристалла $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, легированного мелким донором. Показано, что кулоновский потенциал невозможно рассматривать как малое возмущение, так как он сильно влияет на электронное состояние всей системы, создавая состояние, близкое к примесному для объемного полупроводника.

Использованный в работе подход служит очень хорошим приближением для электронов, так как минимум зоны проводимости – единственный и хорошо отделен от остальных зон по энергиям. В то же время это приближение носит качественный характер для дырок и применимо только для оценки ширины оптической щели.

Дальнейшие исследования следует проводить с учетом многодолинности в многозонной модели и принимать во внимание сильное взаимодействие дырки с оптическими полярными фононами, которое в низкоразмерных системах может значительно усиливаться.

Полученные результаты могут быть использованы при разработке светоизлучающих и фотоприемных устройств на основе нанокристаллов оксида галлия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wang C., Zhang J., Xu S., Zhang C., Feng Q., Zhang Y., Ning J., Zhao S., Zhou H., Hao Y. Progress in state-of-the-art technologies of Ga_2O_3 devices // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2021. Vol. 54. No. 24. P. 243001.
2. Zhang J., Dong P., Dang K., et al. Ultra-wide bandgap semiconductor Ga_2O_3 power diodes // *Nature Communications*. 2022. Vol. 13. July 6. P. 3900.
3. Zhai H., Wu Z., Fang Z. Recent progress of Ga_2O_3 -based gas sensors // *Ceramics International*. 2022. Vol. 48. No. 17. Pp. 24213–24233.
4. Pearton S. J., Yang J., Cary P. H., Ren F., Kim J., Tadjer M. J., Mastro M. A. A review of Ga_2O_3 materials, processing, and devices // *Applied Physics Reviews*. 2018. Vol. 5. No. 1. P. 011301.
5. Nikolskaya A., Okulich E., Korolev D., et al. Ion implantation in $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$: Physics and technology // *Journal of Vacuum Science & Technology A*. 2021. Vol. 39. No. 3. P. 030802.
6. Higashiwaki M. $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ material properties, growth technologies, and devices: A review // *AAPPS (The Association of Asia Pacific Physical Societies) Bulletin*. 2022. Vol. 32. No. 1. P. 3.
7. Zhang J., Shi J., Qi D., Chen L., Zhang K. H. L. Recent progress on the electronic structure, defect, and doping properties of Ga_2O_3 // *APL Materials*. 2020. Vol. 8. No. 2. P. 020906.
8. Frodason Y. K., Krzyzaniak P. P., Vines L., Varley J. B., Van de Walle C. J., Johansen K. M. H. Diffusion of Sn donors in $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ // *APL Materials*. 2023. Vol. 11. No. 4. P. 041121.
9. Wang M., Mu S., Van de Walle C. G. Incorporation of Si and Sn donors in $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ through surface reconstructions // *Journal of Applied Physics*. 2021. Vol. 130. No. 18. P. 185703.
10. Jamwal N. S., Kiani A. Gallium oxide nanostructures: A review of synthesis, properties and applications // *Nanomaterials*. 2022. Vol. 12. No. 12. P. 2061.
11. Rajamani S., Arora K., Belov A., et al. Enhanced solar-blind photodetection performance of encapsulated Ga_2O_3 nanocrystals in Al_2O_3 matrix // *IEEE Sensors Journal*. 2018. Vol. 18. No. 10. Pp. 4046–4052.
12. Korolev D. S., Matyunina K. S., Nikolskaya A. A., et al. Ion-beam synthesis of gallium oxide nanocrystals in a SiO_2/Si dielectric matrix // *Nanomaterials*. 2022. Vol. 12. No. 11. P. 1840.
13. Zhou J., Chen H., Fu K., Zhao Y. Gallium oxide-based optical nonlinear effects and photonics devices // *Journal of Materials Research*. 2021. Vol. 36. No. 23. Pp. 4832–4845.
14. Sigaev V. N., Golubev N. V., Ignat'eva E. S., Paleari A., Lorenzi R. Light-emitting Ga-oxide nanocrystals in glass: A new paradigm for low-cost and robust UV-to visible solar-blind converters and UV emitters // *Nanoscale*. 2014. Vol. 6. No. 3. Pp. 1763–1774.
15. Nguyen K., Radovanovic P. V. Defects and impurities in colloidal Ga_2O_3 nanocrystals: New opportunities for photonics and lighting // *Canadian Journal of Chemistry*. 2022. Vol. 100. No. 1. Pp. 1–8.
16. Yamaguchi K. First principles study on electronic structure of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ // *Solid State Communications*. 2004. Vol. 131. No. 12. Pp. 739–744.
17. Rebrost P., Stopa M., Aspuru-Guzik A. Förster coupling in nanoparticle excitonic circuits // *Nano Letters*. 2010. Vol. 10. No. 8. Pp. 2849–2856.

18. **Pantelides S. T., Sah C. T.** Theory of localized states in semiconductors. I. New results using an old method // *Physical Review B*. 1974. Vol. 10. No. 2. Pp. 621–637.
19. **Neal A. T., Mou S., Rafique S., et al.** Donors and deep acceptors in β -Ga₂O₃ // *Applied Physics Letters*. 2018. Vol. 113. No. 6. P. 062101.
20. **Oishi T., Harada K., Koga Y., Kasu M.** Conduction mechanism in highly doped β -Ga₂O₃ ($\bar{2}01$) single crystals grown by edge-defined film-fed growth method and their Schottky barrier diodes // *Japanese Journal of Applied Physics*. 2016. Vol. 55. No. 3. P. 030305.
21. **Higashiwaki M., Sasaki K., Kamimura T., Wong M. H., Krishnamurthy D., Kuramata A., Masui T., Yamakoshi S.** Depletion-mode Ga₂O₃ metal-oxide-semiconductor field-effect transistors on β -Ga₂O₃ (010) substrates and temperature dependence of their device characteristics // *Applied Physics Letters*. 2013. Vol. 103. No. 12. P. 123511.
22. **Kohn W., Luttinger J. M.** Theory of donor states in silicon // *Physical Review*. 1955. Vol. 98. No. 4. Pp. 915–922.

REFERENCES

1. **Wang C., Zhang J., Xu S., et al.**, Progress in state-of-the-art technologies of Ga₂O₃ devices, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 54 (24) (2021) 243001.
2. **Zhang J., Dong P., Dang K., et al.**, Ultra-wide bandgap semiconductor Ga₂O₃ power diodes, *Nat. Commun.* 13 (July 6) (2022) 3900.
3. **Zhai H., Wu Z., Fang Z.**, Recent progress of Ga₂O₃-based gas sensors, *Ceram. Int.* 48 (17) (2022) 24213–24233.
4. **Pearton S. J., Yang J., Cary P. H., et al.**, A review of Ga₂O₃ materials, processing, and devices, *Appl. Phys. Rev.* 5 (1) (2018) 011301.
5. **Nikolskaya A., Okulich E., Korolev D., et al.**, Ion implantation in β -Ga₂O₃: Physics and technology, *J. Vac. Sci. Technol. A*. 39 (3) (2021) 030802.
6. **Higashiwaki M.**, β -Ga₂O₃ material properties, growth technologies, and devices: A review, *AAPPS Bul.* 32 (1) (2022) 3.
7. **Zhang J., Shi J., Qi D., et al.**, Recent progress on the electronic structure, defect, and doping properties of Ga₂O₃, *APL Mater.* 8 (2) (2020) 020906.
8. **Frodason Y. K., Krzyzaniak P. P., Vines L., et al.**, Diffusion of Sn donors in β -Ga₂O₃, *APL Mater.* 11 (4) (2023) 041121.
9. **Wang M., Mu S., Van de Walle C. G.**, Incorporation of Si and Sn donors in β -Ga₂O₃ through surface reconstructions. *J. Appl. Phys.* 130 (18) (2021) 185703.
10. **Jamwal N. S., Kiani A.**, Gallium oxide nanostructures: A review of synthesis, properties and applications, *Nanomater.* 12 (12) (2022) 2061.
11. **Rajamani S., Arora K., Belov A., et al.**, Enhanced solar-blind photodetection performance of encapsulated Ga₂O₃ nanocrystals in Al₂O₃ matrix, *IEEE Sens. J.* 18 (10) (2018) 4046–4052.
12. **Korolev D. S., Matyunina K. S., Nikolskaya A. A., et al.**, Ion-beam synthesis of gallium oxide nanocrystals in a SiO₂/Si dielectric matrix, *Nanomater.* 12 (11) (2022) 1840.
13. **Zhou J., Chen H., Fu K., Zhao Y.**, Gallium oxide based optical nonlinear effects and photonics devices, *J. Mater. Res.* 36 (23) (2021) 4832–4845.
14. **Sigaev V. N., Golubev N. V., Ignat'eva E. S., et al.**, Light-emitting Ga-oxide nanocrystals in glass: A new paradigm for low-cost and robust UV – to visible solar-blind converters and UV emitters, *Nanoscale*. 6 (3) (2014) 1763–1774.
15. **Nguyen K., Radovanovic P. V.**, Defects and impurities in colloidal Ga₂O₃ nanocrystals: New opportunities for photonics and lighting, *Can. J. Chem.* 100 (1) (2022) 2022 1–8.
16. **Yamaguchi K.**, First principles study on electronic structure of β -Ga₂O₃, *Solid State Commun.* 131 (12) (2004) 739–744.
17. **Rebentrost P., Stopa M., Aspuru-Guzik A.**, Förster coupling in nanoparticle excitonic circuits, *Nano Lett.* 10 (8) (2010) 2849–2856.
18. **Pantelides S. T., Sah C. T.**, Theory of localized states in semiconductors. I. New results using an old method, *Phys. Rev. B*. 10 (2) (1974) 621–637.
19. **Neal A. T., Mou S., Rafique S., et al.**, Donors and deep acceptors in β -Ga₂O₃, *Appl. Phys. Lett.* 113 (6) (2018) 062101.

20. Oishi T., Harada K., Koga Y., Kasu M., Conduction mechanism in highly doped β -Ga₂O₃ ($\bar{2}01$) single crystals grown by edge-defined film-fed growth method and their Schottky barrier diodes, Jap. J. Appl. Phys. 55 (3) (2016) 030305.

21. Higashiwaki M., Sasaki K., Kamimura T., et al., Depletion-mode Ga₂O₃ metal-oxide-semiconductor field-effect transistors on β -Ga₂O₃ (010) substrates and temperature dependence of their device characteristics, Appl. Phys. Lett. 103 (12) (2013) 123511.

22. Kohn W., Luttinger J. M., Theory of donor states in silicon, Phys. Rev. 98 (4) (1955) 915–922.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

РЕВИН Александр Александрович – младший научный сотрудник лаборатории физики и технологии тонких пленок Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23
revinalexandre@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-5701-1171

КОНАКОВ Антон Алексеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры квантовых и нейроморфных технологий Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23
konakov_anton@mail.ru
ORCID: 0000-0001-8850-2651

КОРОЛЕВ Дмитрий Сергеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников, электроники и нанoeлектроники Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23
dmkorolev@phys.unn.ru
ORCID: 0000-0003-1440-2994

THE AUTHORS

REVIN Alexandr A.

National Research Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod
23 Gagarin Ave., Nizhni Novgorod, 603950, Russia
revinalexandre@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-5701-1171

KONAKOV Anton A.

National Research Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod
23 Gagarin Ave., Nizhni Novgorod, 603950, Russia
konakov_anton@mail.ru
ORCID: 0000-0001-8850-2651

KOROLEV Dmitry S.

National Research Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod
23 Gagarin Ave., Nizhni Novgorod, 603950, Russia
dmkorolev@phys.unn.ru
ORCID: 0000-0003-1440-2994

Статья поступила в редакцию 15.04.2024. Одобрена после рецензирования 06.05.2024. Принята 06.05.2024.

Received 15.04.2024. Approved after reviewing 06.05.2024. Accepted 06.05.2024.