

Первопринципный расчет атомных конфигураций в β -Ga₂O₃ в окрестности атома бора при облучении ионами В⁺

© Е.В. Окулич, В.И. Окулич, Д.И. Тетельбаум

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
603022 Нижний Новгород, Россия

E-mail: eokulich@nifti.unn.ru

Поступила в Редакцию 3 февраля 2026 г.

В окончательной редакции 28 мая 2026 г.

Принята к публикации 28 мая 2026 г.

Выполнено первопринципное компьютерное моделирование локальных атомных конфигураций, формирующихся в окрестности атомов бора, внедренных в β -Ga₂O₃ методом ионного облучения. Предполагалось, что после завершения динамической стадии атом бора попадает в одно из междоузлий либо замещает атом галлия (который при этом располагается в соседнем междоузлии), а затем происходит структурная релаксация. Показано, что изменения конфигураций при релаксации в основном можно объяснить химическим взаимодействием атомов бора с атомом кислорода, а также тенденцией к установлению длины связи В-О, близкой к сумме ионных (или атомных) радиусов этих элементов. Полученные результаты могут использоваться для дальнейших расчетов электронной структуры и других параметров β -Ga₂O₃, ионно-легированного бором, что важно для технологии полупроводниковых приборов нового поколения.

Ключевые слова: оксид галлия, ионная имплантация, ионное легирование бором, атомная структура, компьютерное моделирование.

DOI: 10.61011/FTP.2026.02.63455.9368

1. Введение

Оксид галлия вызвал чрезвычайно большой интерес исследователей и разработчиков ряда актуальных областей техники (таких как силовоточная электроника, УФ-фотоника, газовая сенсорика, связь) благодаря уникальным свойствам, отвечающим современным требованиям этих областей: большая ширина запрещенной зоны (~ 5 эВ), высокие пробивные напряжения, радиационная, химическая и термическая стойкость и др.

Как известно, одним из наиболее востребованных и эффективных методов полупроводниковой микроэлектроники является ионная имплантация. Несмотря на то что этот метод уже довольно часто применяется разработчиками приборов на основе β -Ga₂O₃ [1–6], физико-химические основы метода для данного материала еще слабо разработаны, особенно в случае легирования химически активными элементами.

Одним из потенциально востребованных в технологии оксида галлия элементов является бор. Не считая весьма ядовитого бериллия, бор обладает наименьшей атомной массой среди химически активных элементов, благодаря чему ускоренные ионы В⁺ при прочих равных условиях создают меньше радиационных повреждений и проникают на большую глубину. Бор изовалентен галлию и поэтому, замещая в основном узлы галлия, казалось бы, не должен обладать электрической активностью. Однако опыты показали, что ионно-легированные бором слои могут обладать довольно высокой проводимостью [7]. Поэтому ионное легирование бором в технологии полупроводниковых приборов может использоваться как для компенсации электрической активности примесей путем

внесения глубоких дефектных центров [8], так и для создания проводящих слоев.

С фундаментальной точки зрения имплантация бора представляет значительный интерес как трехвалентная примесь с наименьшим атомным номером и наименьшим ионным и атомным радиусами. По сравнению с галлием бор обладает более сильной химической связью с кислородом [9]. Эти факторы могут существенно повлиять на равновесную атомную конфигурацию в окрестности атома бора и его взаимодействие с радиационными дефектами. Например, интересно выяснить поведение атома бора при попадании его в междоузлия разного размера. Для случая замещения атомом бора узлового атома галлия может происходить сильная локальная деформация из-за ионных и атомных радиусов, что повышает потенциальную энергию и создает стимул для изменения атомной конфигурации.

Свойства легированного бором галлия мало изучены. В работе [10] исследовался твердый раствор (Ga_{1-x}B_x)₂O₃, синтезированный золь-гельным методом. В работе [11] исследованы структурные свойства и профили распределения элементов в β -Ga₂O₃, облученном ионами бора, а в работе [7] наряду со структурой изучены оптические и электрические свойства имплантированных слоев β -Ga₂O₃:В. В работе [12] исследована катодоллюминесценция, а в работе [13] — фазовый переход β -Ga₂O₃ в γ -фазу. Электронная структура β -Ga₂O₃, легированного бором, была рассчитана из первых принципов в работах [14–16], но при этом не учитывались истинные атомные конфигурации в случае ионного облучения.

Настоящая работа посвящена первопринципному компьютерному расчету локальных атомных конфигураций,

Таблица 1. Параметры релаксации и расстояния

Параметр	Междоузлие 1, маленькое	Междоузлие 2, крупное	Междоузлие 3, среднее
Длина вектора смещения атома бора, Å	0.50	0.72	0.74
Выигрыш в энергии при релаксации, эВ	15.16	4.19	5.95
Расстояние от атома бора до ближайшего атома кислорода до релаксации, Å	1.10	1.38	1.52
Расстояние от атома бора до ближайшего атома кислорода после релаксации, Å	1.50	1.47	1.41

реализующихся в окрестностях атома бора, внедренного в $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ методом ионной имплантации, с учетом структурной релаксации — перестройки, обусловленной принципом минимизации энергии. Предполагалось, что после завершения динамической стадии движения ускоренного иона он попадает в одно из междоузлий либо замещает узел галлия (который при этом располагался в смежном междоузлии), а затем происходит релаксация.

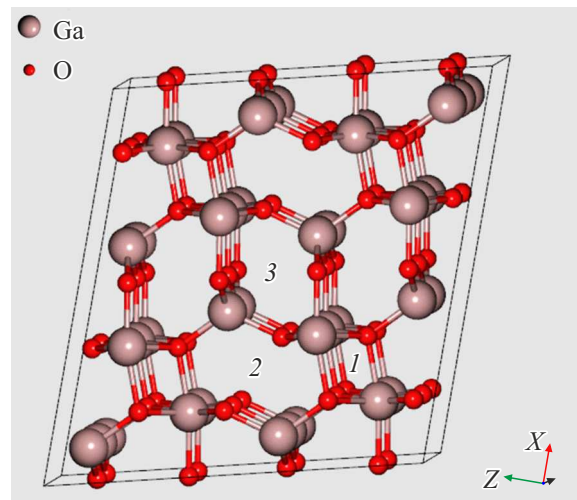
2. Методика расчетов

Использование программных пакетов, реализующих первопринципные расчеты атомных конфигураций методом псевдопотенциала в случае исследования слоев, подвергнутых ионной имплантации, представляется целесообразным, поскольку эти пакеты позволяют оценить структурные перестройки неравновесных атомных конфигураций.

В настоящем исследовании использовался программный пакет Quantum Espresso [17]. Расчет проводился с использованием модельной суперъячейки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, включающей четыре элементарных ячейки (80 атомов) и полученной путем размножения (трансляции) одной элементарной ячейки (размеры $a = 12.45 \text{ \AA}$, $b = 3.08 \text{ \AA}$, $c = 5.88 \text{ \AA}$) [18]. Для расчета использовался Ultrasoft (US) [17] псевдопотенциал с Perdew, Burke, and Ernzerhof (PBE) функционалом [19]. Энергия обрезания (cutoff energy) принималась равной 400 эВ [20], а критерий сходимости силовых полей, соответствующих релаксации решетки равновесного состояния, был выбран равным $2.6 \cdot 10^{-2}$ эВ/Å. На каждом шаге итеративного процесса нахождения конечной равновесной конфигурации атомов фиксировались координаты и энергия кристаллита.

3. Результаты и обсуждение

Далее рассмотрены различные варианты исходной позиции имплантированного атома бора и находящихся в непосредственной близости от него дефектов — компонент пар Френкеля. Так как рассмотрение всех возможных вариантов заняло бы слишком много места, мы

Рис. 1. Атомная структура моделируемой ячейки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$.

ограничились лишь некоторыми случаями, демонстрирующими типичные особенности возможного поведения системы.

Вариант 1. Атом бора до релаксации расположен в одном из междоузлий

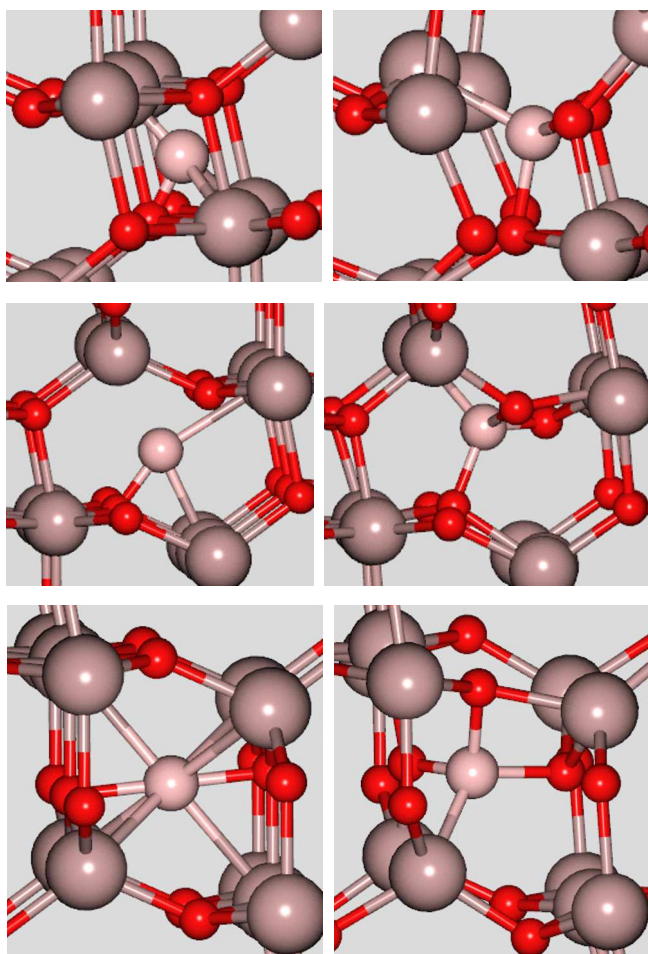
На рис. 1 приведена структура элементарной ячейки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. Показано наличие трех типов междоузлий, условно названных „малое“, „крупное“ и „среднее“.

На рис. 2 показаны начальные положения атома бора (до релаксации) — в центрах каждого из междоузлий, и их положения после релаксации. В табл. 1 приведены соответствующие расстояния этих атомов до ближайших атомов галлия и кислорода, а также длины векторов смещения атомов бора. Видно, что в результате релаксации произошло значительное перемещение как самого атома бора, так и соседних атомов.

Из табл. 1 видно, что до релаксации расстояние между атомом бора в малом междоузлии и соседним атомом кислорода было меньше суммы ионных (и атомных) радиусов бора и кислорода (см. табл. 2). Возрастание данного расстояния при релаксации и приближение его к сумме радиусов вполне объяснимо: это сопровождается

Таблица 2. Ионные и атомные радиусы атомов галлия, кислорода и бора [21,22]

Атом	Ионный радиус, Å	Атомный радиус, Å
Галлий	0.62	1.39
Кислород	1.36	0.71
Бор	0.20	0.91

**Рис. 2.** Атомная конфигурация для варианта 1 до (слева) и после (справа) релаксации. Атомы кислорода — малые красные шарики, атомы галлия — крупные розово-коричневые шарики, атом бора — средний светло-розовый шарик. Исходные позиции атома бора — в центре малого, крупного и среднего междоузлий (верхний, средний и нижний ряды соответственно).

значительным выигрышем в энергии. Для крупного и среднего междоузлий отклонение от суммы радиусов до релаксации существенно меньше, поэтому изменение расстояний В-О при релаксации также невелико. Интересно, однако, что длина вектора смещения атома В для крупного и среднего междоузлий больше, чем для малого междоузлия, т. е. длина вектора не коррелирует с

изменением межатомных расстояний. По-видимому, это обусловлено тем, что при релаксации доминирующим является не столько размерный, сколько „химический“ фактор — сила связи.

Вариант 2. До релаксации атом бора расположен в одном из междоузлий, а в ближайшем окружении расположена вакансия кислорода

Очевидно, что вероятность этого варианта возрастает с ростом дозы, когда атом бора оказывается в области, насыщенной вакансиями, созданными не только данным атомом, но и перекрытием каскадов смещения от других ионов.

На рис. 3 показаны атомные конфигурации до и после релаксации, а в табл. 3 приведены расстояния

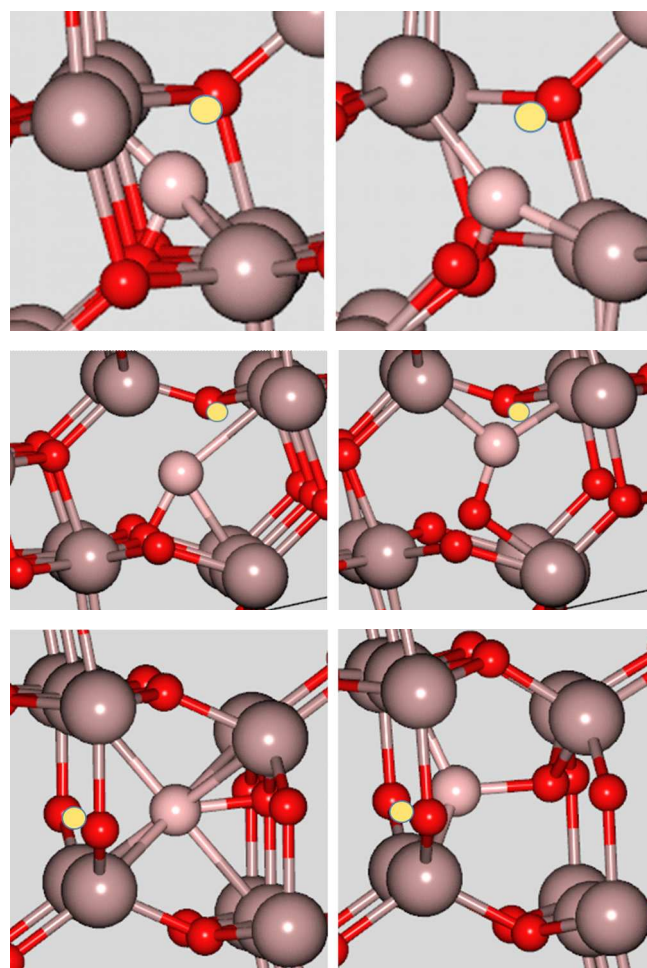
**Рис. 3.** Атомная конфигурация для варианта 2 до (слева) и после (справа) релаксации. Атомы кислорода — малые красные шарики, атомы галлия — крупные розово-коричневые шарики, атом бора — средний светло-розовый шарик. Положение вакансии кислорода показано желтым кружком. Исходные позиции атома бора — в центре малого, крупного и среднего междоузлий (верхний, средний и нижний ряды соответственно).

Таблица 3. Параметры релаксации для варианта 2

Параметр	Междоузлие 1, маленькое	Междоузлие 2, крупное	Междоузлие 3, среднее
Длина вектора смещения атома бора, Å	0.66	1.00	0.68
Выигрыш в энергии при релаксации, эВ	12.91	3.89	3.58
Расстояние от атома бора до вакансии O до релаксации, Å	1.89	2.07	1.52
Расстояние от атома бора до вакансии O после релаксации, Å	1.67	1.09	0.88
Расстояние от атома бора до ближайшего атома кислорода до релаксации, Å	1.10	1.38	1.52
Расстояние от атома бора до ближайшего атома кислорода после релаксации, Å	1.37	1.38	1.54

Таблица 4. Параметры релаксации для варианта 3

Параметр	Междоузлие 1 маленькое	Междоузлие 2 крупное	Междоузлие 3 среднее
Длина вектора смещения атома бора, Å	1.03	1.16	0.66
Выигрыш в энергии при релаксации, эВ	16.37	9.34	9.27
Расстояние от атома бора до вакансии Ga до релаксации, Å	1.97	2.95	2.40
Расстояние от атома бора до вакансии Ga после релаксации, Å	1.10	3.76	1.81

Таблица 5. Параметры релаксации для варианта 4

Параметр	Междоузлие 1, маленькое	Междоузлие 2, крупное	Междоузлие 3, среднее
Длина вектора смещения атома бора, Å	1.29	1.32	1.15
Длина вектора смещения атома галлия, Å	1.46	1.13	0.92
Выигрыш в энергии при релаксации, эВ	14.99	3.91	12.28
Расстояние от атома бора до ближайшего атома кислорода до релаксации, Å	1.97	1.97	1.86
Расстояние от атома бора до ближайшего атома кислорода после релаксации, Å	1.50	1.38	1.37

между атомом бора и ближайшим атомом кислорода до и после релаксации, расстояния между атомом бора и кислородной вакансией до релаксации, расстояние между атомом бора после релаксации и местом первоначального расположения вакансии, длины векторов смещения атома бора, а также выигрыши в энергии.

Для данного варианта поведение бора при релаксации мало отличается от варианта 1; длины векторов смещения атома бора для малого и среднего междоузлий почти одинаковы, а для крупного междоузлия они выше. Это можно по-прежнему объяснить с доминированием „химического“ фактора, а именно „стремлением“ бора вступить в „нормальную“ связь с кислородом. Разница с вариантом 1 состоит в большей длине вектора смещения

атома бора. По-видимому, это обусловлено уменьшением локальной атомной плотности при наличии вакансии и, соответственно, большей свободой перемещения атомов. Тем же объясняется уменьшение выигрыша в энергии.

Вариант 3. До релаксации атом бора расположен в одном из междоузлий, а в ближайшем окружении расположена вакансия галлия

Как видно из рис. 4 и табл. 4, в результате релаксации атом бора в случае малого и среднего междоузлий приближается к начальной позиции вакансии, а в случае

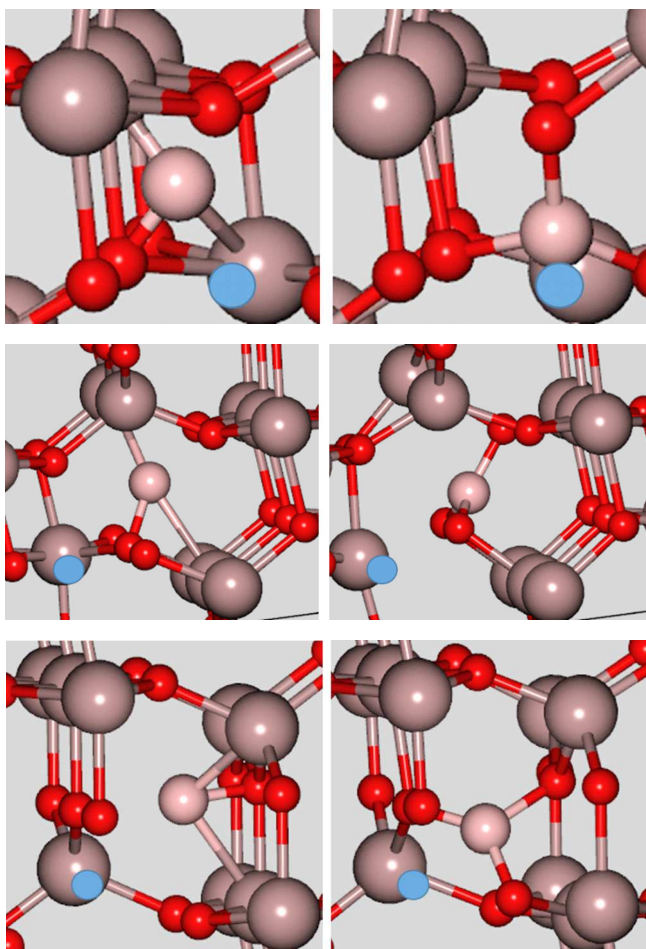


Рис. 4. Атомная конфигурация для варианта 3 до (слева) и после (справа) релаксации. Атомы кислорода — малые красные шарики, атомы галлия — крупные розово-коричневые шарики, атом бора — средний светло-розовый шарик. Положение вакансии галлия показано голубым кружком. Исходные позиции атома бора — в центре малого, крупного и среднего междоузлий (верхний, средний и нижний ряды соответственно).

крупного — отдаляется. Но во всех трех случаях не наблюдается замещения вакансии атомом бора, т.е. образования сплава замещения. Заметна также тенденция к укорочению длины связи В-О, что еще раз свидетельствует о доминирующем влиянии „химического“ фактора.

Вариант 4. До релаксации в одном из междоузлий расположен атом галлия, а атом бора находится в узле галлия

Подобная ситуация, как и для предыдущего варианта, типична для ионного облучения.

Как и ранее, нами были рассмотрены процессы релаксации для трех видов междоузлий. Положения атомов до и после релаксации изображены на рис. 5, а в табл. 5 приведены длины векторов смещения атома бора,

межатомные расстояния и величины энергетического выигрыша.

Из рис. 5 видно, что в случае первоначального расположения атома бора в малом междоузлии произошло его вытеснение находившимся в центре междоузлия атомом галлия и переход последнего на освободившееся место. При этом атом бора „ушел“ от междоузлия практически в противоположном от междоузлия направлении. Для двух других случаев изменения конфигурации при релаксации носят менее регулярный характер и сопровождаются более сильным локальным разупорядочением, хотя длины векторов смещения бора для всех трех случаев мало различаются.

Что касается энергий, то в отличие от вариантов 1 и 2 выигрыш энергии при релаксации существенно меньше. Наиболее важно заметить, что ни для одной из начальных конфигураций после релаксации не реализуется

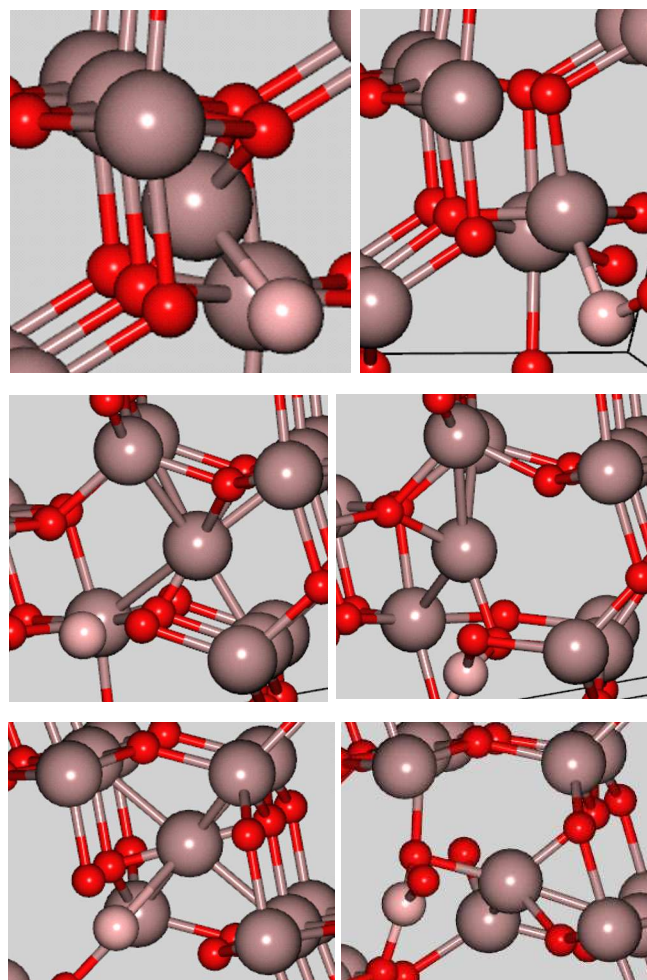


Рис. 5. Атомная конфигурация для варианта 4 до (слева) и после (справа) релаксации. Атомы кислорода — малые красные шарики, атомы галлия — крупные розово-коричневые шарики, атом бора — средний светло-розовый шарик. Исходные позиции атома бора — в центре малого, крупного и среднего междоузлий (верхний, средний и нижний ряды соответственно).

замещение атомом бора вакантного узла галлия: бор как бы „избегает“ попадания в вакансию. Это можно объяснить тем, что химическое взаимодействие между атомом бора и атомом кислорода стремится приблизить длину связи В-О к значению, близкому к значению суммы ионных (или атомных) радиусов этих элементов, если первоначально это значение существенно отличалось от данной суммы.

4. Заключение

Приведенные результаты расчетов позволяют сделать вывод, что при ионной имплантации бора в β -Ga₂O₃ вокруг атомов бора создаются сильные локальные деформации. Это не позволяет рассматривать сформировавшиеся атомные конфигурации в „традиционных“ терминах дефектов по Френкелю или по Шоттки. При этом из двух интуитивно предполагаемых основных факторов, приводящих к трансформации, — размерного и химического — прослеживается доминирование химического фактора. Это обстоятельство, по-видимому, обусловлено большой величиной химической связи В-О, о чем свидетельствует тот факт, что величина химической связи В-О в соединении В₂O₃ существенно выше, чем в Ga₂O₃ [9].

Может возникнуть вопрос — почему исследование спектров катодолюминесценции в β -Ga₂O₃, подвергнутых имплантации бора [12], показало наличие тех же линий, что и в *beta*-Ga₂O₃, не подвергавшегося имплантации. Ответ состоит в следующем. Во-первых, концентрация бора, имплантируемого в β -Ga₂O₃, существенно ниже, чем концентрация генерированных дефектов Френкеля (в отсутствие отжига); в этих условиях трудно зафиксировать линии люминесценции, созданные группами атомов, локализованных вокруг атомов бора, даже если такие линии имеются. Во-вторых, указанные группы, по-видимому, являются не центрами люминесценции, а центрами безызлучательной рекомбинации.

В любом случае влияние имплантации бора на структуру и свойства оксида галлия требует дальнейшего исследования, в том числе путем первопринципных расчетов электронных спектров. Открытым остается, в частности, вопрос о механизмах поведения структуры и свойств имплантированных слоев после термических отжигов. Возможно, замеченный в работе [7] эффект выхода бора из узлов решетки с ростом дозы в отожженных образцах отражает найденную тенденцию энергетической невыгодности нахождения атома бора в узлах галлия.

Полученные в работе результаты могут быть использованы для дальнейших расчетов электронных спектров и других свойств оксида галлия, ионно-легированных бором.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-00052, <https://rscf.ru/project/23-79-00052/>

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Y. Feng, H. Zhou, S. Alghamdi, H. Fang, X. Zhang, Y. Chen, G. Tian, S. Wasly, Z. Zheng, M. Xiang, Y. Hao, J. Zhang. *IEEE*, **72**, 1528 (2025). DOI: <https://doi.org/10.1109/TED.2025.3526118>
- [2] Y. Gao, A. Li, Q. Feng, Z. Hu, Z. Feng, K. Zhang, X. Lu, C. Zhang, H. Zhou, W. Mu, Z. Jia, J. Zhang, Y. Hao. *NRL*, **14**, 8 (2019). DOI: <https://doi.org/10.1186/s11671-018-2849-y>
- [3] M. Higashiwaki, K. Sasaki, T. Kamimura, M.H. Wong, D. Krishnamurthy, A. Kuramata, T. Masui, S. Yamakoshi. *APL*, **103**, 123511 (2013). <https://doi.org/10.1063/1.4821858>
- [4] R.H. Horng, A. Sood, S. Rana, N. Tumilty, F.G. Tarntair, C. Langpoklakpam, H.C. Kuo, J.P. Singh. *MTA*, **18**, 100382 (2023). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mtadv.2023.100382>
- [5] A.E. Islam, N.P. Sepelak, K.J. Liddy, R. Kahler, D.M. Dryden, J. Williams, H. Lee, K. Gann, A. Popp, K.D. Leedy, N.S. Hendricks, J.L. Brown, E.R. Heller, W. Wang, W. Zhu, M.O. Thompson, K.D. Chabak, A.J. Green. *APL*, **121**, 243501 (2022). <https://doi.org/10.1063/5.0113744>
- [6] A. Nikolskaya, E. Okulich, D. Korolev, A. Stepanov, D. Nikolichev, A. Mikhaylov, D. Tetelbaum, A. Almaev, C.A. Bolzan, A. Buaczik, Jr., R. Giuliani, P.L. Grande, A. Kumar, M. Kumar, D. Gogova. *JVST*, **39** (3), 030802 (2021). <https://doi.org/10.1116/6.0000928>
- [7] A.A. Nikolskaya, D.S. Korolev, A.A. Revin, A.I. Belov, A.V. Kudrin, V.N. Trushin, A.V. Zdoroveyshchev, D.A. Zdoroveyshchev, A.N. Mikhailov, M.N. Drozdov, P.A. Yunin, E.V. Okulich, D.I. Tetelbaum. *Book of abstracts 21st Int. Conf. on Defects in Insulating Materials (Astana, ICDIM, 2024)* p. 43.
- [8] H. Liu, Y. Wang, Y. Lv, S. Han, T. Han, S. Dun, H. Guo, A. Bu, Z. Feng. *IEEE*, **44** (7), 1048 (2023). <https://doi.org/10.1109/LED.2023.3279431>
- [9] P.G. Wenthold, J.B. Kim, K.L. Jonas, W.C. Lineberger. *JPC*, **101**, 4472 (1997). <https://doi.org/10.1021/jp970645u>
- [10] W. Xu, L. Chen, S. Han, P. Cao, M. Fang, W. Liu, D. Zhu, Y. Lu. *JPC*, **124**, 8015 (2020). <https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c01281>
- [11] A.A. Nikolskaya, D.S. Korolev, V.N. Trushin, M.N. Drozdov, P.A. Yunin, E.A. Pitirimova, A.V. Kudrin, E.V. Okulich, V.I. Okulich, A.N. Mikhaylov, D.I. Tetelbaum. *NIMB*, **537**, 65 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2023.01.014>
- [12] E. Zykova, A. Tatarintsev, A. Ieshkin, N. Orlikovskaya, A. Nikolskaya, D. Korolev, A. Revin, A. Konakov, D. Tetelbaum. *JVSTA*, **44**, 023202 (2026). <https://doi.org/10.1116/6.0004996>
- [13] P. Yunin, D. Tatarskiy, A. Nikolskaya, D. Korolev, A. Konakov, A. Nazarov, K. Matyunina, M. Drozdov, D. Tetelbaum. *JAC*, **59**, 483 (2026). <https://doi.org/10.1107/s1600576726001019>
- [14] X. Liu, C. Sammarco, G. Zeng, D. Guo, W. Tang, C.K. Tan. *APL*, **117**, 012104 (2020). <https://doi.org/10.1063/5.0005808>
- [15] J. Zhu, Y. Pan, M. Wen, F. Yang. *JAC*, **1011**, 178426 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2024.178426>

- [16] A. Nikolskaya, D. Korolev, P. Yunin, D. Tatarskiy, V. Trushin, K. Matyunina, M. Savushkina, A. Mikhaylov, M. Drozdov, A. Nazarov, A. Kudrin, A. Revin, A. Konakov, A. Stepanov, D. Tetelbaum. *Vacuum*, **235**, 1141129 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2025.114129>
- [17] <https://www.quantum-espresso.org/>
- [18] A. Kyrtos, M. Matsubara, E. Bellotti. *PRB*, **95**, 245202 (2017). <https://doi.org/10.1016/10.1103/PhysRevB.95.245202>
- [19] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. *PRL*, **77** (18), 3865 (1996). <https://doi.org/10.1016/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- [20] J. Yang, Y. Jing, Z. Yang, J. Zhao, W. Lib, J. Yan, J. Yang, X. Li. *RSC Advances*, **15**, 38260 (2025). <https://doi.org/10.1039/D5RA05380C>
- [21] *Структурная химия. Факты и зависимости* (М., Диалог-МГУ, 2000).
- [22] S. Geller. *JCP*, **33** (3), 676 (1960). <https://doi.org/10.1063/1.1731237>

Редактор Г.А. Оганесян

First-principles calculation of atomic configurations in the vicinity of the boron atom in β -Ga₂O₃ irradiated with B⁺ ions

E.V. Okulich, V.I. Okulich, D.I. Tetelbaum

Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,
603022 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract First-principles computer simulation of the local atomic configurations forming in the vicinity of boron atoms embedded into β -Ga₂O₃ by ion irradiation has been performed. It was assumed that after the dynamic stage is completed, the boron atom either occupies one of the interstitial sites or substitutes a gallium atom (which then relocates to a neighbouring interstitial site), followed by structural relaxation. It has been shown that the changes in configurations caused by relaxation can mainly be explained by the chemical interaction between boron and oxygen atoms and the tendency to establish a B-O bond length close to the sum of the ionic (or atomic) radii of these elements. The obtained results can be used for further calculations of the electronic structure and other parameters of ion-implanted boron-doped β -Ga₂O₃, that is important for the development of next-generation semiconductor device technologies.