

# **HIGH-LEVEL CALCULATIONS ON DEFECTS AND SURFACES OF SEMICONDUCTORS**

Prof. Dr. Peter **Deák** und Dr. Bálint **Aradi**

Bremen Center for Computational Materials Science, University of Bremen

28. Januar 2018

## Zusammenfassung

Die Funktionalität der Halbleiter ist eng mit ihren Defekten verbunden, die das elektronische und optische Verhalten des Bulk-Materials und das chemische Verhalten der Oberfläche steuern. In den letzten Jahren entstanden mehrere Herausforderungen für die theoretische Beschreibung von Defekten. Während die gewöhnlichen lokalen (LDA) und semi-lokalen (GGA) Approximationen der Dichtefunktionaltheorie (DFT) eine wichtige Rolle beim Verständnis der Eigenschaften von Defekten in herkömmlichen Halbleitern gespielt haben, scheitern sie oft in Materialien mit breiter Bandlücke. Die Anwendung von *first-principles* Mehrteilchen-Methoden für Defektrechnungen ist problematisch und deshalb haben sich in den letzten Jahren Hybrid-Funktionale (wie HSE06) als nützliche Alternative behauptet. Das vorliegende Projekt befasst sich mit der Anwendung, Verfeinerung und möglichen Erweiterung von HSE-Typ-Funktionalen für Defekte und Oberflächen von ionischen Halbleitern mit breiter Bandlücke. In Rahmen des DFG-Projektes FR2833/63-1 werden Ga-basierte Halbleiter untersucht. Gleichzeitig wollen wir weiter an einem selbstkonsistenten und allgemeinen Ladungskorrekturschema arbeiten, das die Untersuchung von Ladungsübertragungsreaktionen in periodischen Modellen einer Fest- / Gas-Grenzfläche ohne künstliche Größeneffekte ermöglicht. In Rahmen des DFG-Projektes DE1158/8-1 untersuchen wir Reaktionen auf der TiO<sub>2</sub> Oberfläche. Für die Weiterführung unserer Arbeiten beantragen wir 120 000 NPL über 3 Quartalen ab 01.04.2018.

## SUMMARY

The functionality of semiconductors is closely connected to their defects, which control the electronic and optical behavior of the bulk material and the chemical behavior of the surface. In recent years, several challenges arose for defect theory. While the standard local (LDA) and semi-local (GGA) approximations of density functional theory (DFT) have played an important role in understanding the properties of defects in traditional semiconductors, they often fail completely in wide band gap materials. The use of first-principles methods beyond (semi)local DFT is problematic for defect calculations, however, in recent years, screened hybrid functionals (like HSE06) have emerged as a useful alternative. The present project deals with the application, refinement and possible extension of HSE-type functionals for defects and surfaces of wide band gap ionic semiconductors. In the framework of the DFG-Projects FR2833/63-1, Ga-based semiconductors will be investigated. At the same time, we want to work further on a self-consistent and general charge correction scheme, which allows the investigation of charge transfer reactions in periodic models of a solid/gas interface without spurious size effects. In the framework of the DFG-Projects DE1158/8-1, reactions on the TiO<sub>2</sub> surface will be studied. For the continuation of our work, we apply for 120 000 NPL distributed over 3 quarters beginning 01.04.2018.