

# 碲镉汞材料中 Hg 空位缺陷的第一性原理研究\*

孙立忠 陈效双† 周孝好 孙沿林 全知觉 陆 卫

(中国科学院上海技术物理研究所红外物理国家重点实验室, 上海 200083)

(2004 年 7 月 15 日收到, 2004 年 10 月 11 日收到修改稿)

利用基于第一性原理的全电子势线性缀加平面波方法计算了在碲镉汞材料中 Hg 空位所引起的晶格弛豫以及空位对周围原子成键机制的影响. 通过成键过程中电荷密度的变化以及电荷转移的讨论, 论述了碲镉汞材料 Hg 空位引起的弛豫以及这种弛豫产生的主要原因. 通过态密度的计算和分析, 发现 Hg 空位的形成将导致第一近邻阴离子 Te 的 5s 态能量向高能端移动了 0.55 eV, 并借助 Te 5s 态电荷密度与成键电荷密度的计算结果, 分析了引起该能态能量平移的主要原因. 通过带边态密度变化以及 Kohn-Shan(KS)单电子能级的计算和分析, 得出了 Hg 空位使碲镉汞材料的光跃迁能量变小响应波长变长, 等效于材料带隙变小的结论. 通过 KS 电子能级的计算分析得到了 Hg 空位缺陷引起的双受主能级随不同电离态的变化趋势.

关键词: 碲镉汞, Hg 空位, 线性缀加平面波方法

PACC: 7115A, 7155G

## 1. 引 言

碲镉汞( $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ )是用于制作红外探测器的重要半导体材料. 由于其禁带宽度随组分的变化可以从零连续增大到 1.5 eV(CdTe 在 300 K 的禁带宽度), 因此可用来制作各种响应波段的红外探测器<sup>[1]</sup>. 尤其是 1—3  $\mu\text{m}$  和 8—14  $\mu\text{m}$  的红外探测器, 在资源卫星、气象卫星以及夜视、火控、制导等领域已得到广泛应用并具有更多的潜在应用前景<sup>[2]</sup>. 我们知道, 半导体材料在生长过程中会产生缺陷, 这种缺陷是电激活的, 由于缺陷和载流子间的相互作用, 使得缺陷的存在严重影响半导体的光学和电学性质. 在碲镉汞材料中, Hg 空位缺陷是碲镉汞材料中的主要缺陷形态之一<sup>[3,4]</sup>. 由于 Hg 空位表现为双受主态<sup>[5,6]</sup>, 因此, 一方面 Hg 空位可以形成 p 型材料(由于 Hg 空位形成的 p 型材料的电子迁移率低等原因, 目前的 p 型碲镉汞材料主要通过 V 族掺杂制备), 另一方面由于碲镉汞材料在生长过程中必然伴随着 Hg 空位的存在, 激活的 Hg 空位对碲镉汞材料 n 型掺杂形成补偿作用, 限制 n 型掺杂的载流子浓度<sup>[7]</sup>. 除了在材料制备和各种处理过程中可以产生

缺陷外, 由于各种辐照损伤也同样会在材料中形成 Hg 空位缺陷. 目前碲镉汞光导器件已经成功地应用于航天、航空及军事等领域. 在复杂的太空环境下工作, 探测器不可避免地受到紫外线、 $\gamma$  射线的照射和质子、中子等粒子的轰击, 研究表明各种辐照损伤造成器件性能下降的主要原因也来自于辐照形成的 Hg 空位<sup>[8,9]</sup>. 因此, 碲镉汞材料中的 Hg 空位的电子行为引起了人们的普遍重视. 但是, 迄今为止对于 Hg 空位的研究主要集中在缺陷浓度控制、杂质能级以及相应的实验表征上, 对于形成 Hg 空位后对材料的成键机制的影响、形成空位后的悬挂键的分布形态以及能带结构变化机制等一直未见相应的报道. 本文利用基于第一性原理的全电子势线性缀加平面波方法(FP-LAPW)<sup>[10,11]</sup>, 针对  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  组分  $x = 0.5$  时的材料中 Hg 空位的情况进行了模拟. 模拟计算的主要内容包括存在 Hg 空位时, Hg 空位所引起的周围原子的弛豫、存在缺陷体系的态密度(DOS)相对完整材料的态密度的变化、空位对周围原子成键态的影响以及伴随空位出现的悬挂键的分布形式等. 本文选用了  $\text{Hg}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$  体系, 这种组分选择的原因主要是考虑到这样的计算, 结果一方面

\* 中国科学院“百人计划”(批准号 200112)、国家自然科学基金重点项目(批准号: 10234040, 60476040, 60221502)、上海市科学技术委员会重点基金(批准号: 02DJ14066)、上海市信息化专项资金(批准号: 2003F012)和国家重点基础研究发展规划(批准号: 2001CB610407)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xschen@mail.sitp.ac.cn

在某种程度上可以同时与研究比较成熟的 II-VI 族化合物中的 CdTe, HgTe 的结果相比较, 另一方面又兼顾了  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  材料中合金化效应的存在. 因此, 本文中的计算结果对  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  材料的其他组分以及相应的 II-VI 族半导体材料均具有相应的适用性.

## 2. 计算方法与过程

FP-LAPW 方法的基本思想是将组成固体中的原胞分为两个区域, 即以原子为中心的非交叠的球形区(即所谓的 muffin-tin 球, 或称 MT 球)和球间区. 在 MT 球内认为波函数、势场及电荷密度都具有球对称性, 这样在 MT 球内的波函数可以按照具有球对称的径向波函数与球谐函数的乘积展开. 而在球间区认为势场的变化比较平缓(通常取为常数势), 可以按照平面波的方法展开. 同时, 要求 MT 球内和间隙区的波函数和波函数的一阶导数在 MT 球面上连续. 在本文的计算过程中,  $\text{Hg}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$  材料中 Te, Hg, Cd 三种组分的 MT 球半径分别为 0.143, 0.140, 0.140 nm.  $R_{\text{MT}}K_{\text{max}} = 7$ , 其中  $R_{\text{MT}}$  为 MT 球半径,  $K_{\text{max}}$  为平面波展开过程中的能量截断值. 交换关联能我们选用了 Perdew 等<sup>[12]</sup>参数优化后的广义梯度近似. 为了尽可能准确地模拟碲镉汞材料中的缺陷行为, 减小缺陷间的耦合作用, 我们这里选用了 64 个原子的超原胞, 该超原胞中包括 32 个 Te 原子位, 16 个 Cd 原子位和 16 个 Hg 原子位. 在缺陷情况的计算中 (0.5, 0.5, 0.5) 晶格位置上的 Hg 被空位取代. 为了与完整材料相对比, 我们同时计算了不包括 Hg 空位的 64 个原子的超原胞. 模拟的过程以单位原胞的总能量变化小于  $10^{-4}$  eV 为收敛判据完成自洽计算. 由于缺陷的存在必然会引起缺陷周围原子的弛豫, 本文采用了所谓类牛顿力学的方法<sup>[13]</sup>对缺陷引起的原子弛豫进行了计算, 计算的主要过程是利用自洽后的体系总能得到每个原子的受力, 然后沿着受力方向移动原子, 重复以上过程直到原胞中每个原子的受力小于 0.005 eV/nm 为止.

研究材料的成键机制的最有利工具就是态密度和电荷密度. 态密度和分态态密度(p-DOS)的计算采用了改进的正四面体积分方法<sup>[14]</sup>. 电荷密度分布可以很直观地反映成键过程中的电荷分布情况、成键形态以及空位形成后悬挂键的分布形式. 为了研究在成键过程中的电荷移动, 本文在计算得到了体

系总的电荷密度分布的同时, 还计算分析了成键电荷密度<sup>[15]</sup>, 所谓成键电荷密度的计算公式如下:

$$\Delta\rho(r) = \rho_{\text{solid}}(r) - \sum_{\alpha} \rho_{\alpha}(r - r_{\alpha}), \quad (1)$$

其中  $\rho_{\text{solid}}(r)$  为体系总的电荷密度,  $\sum_{\alpha} \rho_{\alpha}(r - r_{\alpha})$  为在晶格格点上的原子电荷密度的简单叠加. 通过成键电荷密度的计算和分析, 可以清楚地得到在成键过程中成键电子耦合过程中的电荷移动以及成键方向等性质.

## 3. 计算结果及讨论

缺陷的存在必然会引起缺陷周围原子的弛豫, 表 1 中我们统计了在  $\text{Hg}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$  中出现 Hg 空位后, 空位第一近邻的 4 个阴离子 Te、第二近邻的 8 个 Cd 和 4 个 Hg 等 12 个阳离子相对于 Hg 空位弛豫前后径向距离的变化与变化率, 同时也给出了 Hg 空位第一近邻阴离子与第二近邻阳离子之间的 Te—Hg, Te—Cd 键的键长变化及变化率, 表中的负号表示原子相对空位方向收缩.  $\text{Te}^1\text{—Hg}^2$  和  $\text{Te}^1\text{—Cd}^2$  为 Hg 空位的第一近邻 Te 与空位第二近邻阳离子之间的键长. 该弛豫结果表明当碲镉汞材料中出现 Hg 空位后, 空位周围的第一近邻的 4 个阴离子和第二近邻的 12 个阳离子都是向空位收缩. 这种出现空位缺陷后的弛豫行为与 Si 材料中出现空位后的弛豫行为有所不同, Si 材料中出现空位后, 空位近邻向外扩张. 碲镉汞材料在成键时, Te 原子和 Hg 原子分别贡献 6 个和 2 个成键电子给 4 个极性共价键, 当形成 Hg 空位时同时移走了 Hg 的 2 个成键电子, 这样空位的每个第一近邻 Te 原子将出现 3/2 个有效电荷的悬挂键, 这些悬挂键会与近邻以及次近邻通过电子共振耦合进行重整. 图 1 为计算得到的包含 Hg 空位 ( $V_{\text{Hg}}$ ) 的 (110) 面的电荷密度以及成键电荷密度. 从图 1(a) 我们可以看到, 由于悬挂键重整使得空位第二近邻 Cd 原子与在 (110) 面上的 2 个近邻 Te 原子的成键电荷的分布出现差别, Cd 与靠近空位的 Te 原子的成键电荷明显增加了, 这种变化的主要原因在于悬挂键电荷重整后的加入. 同时我们还发现, 在空位的 2 个在 (110) 面上的第一近邻 Te 之间以及空位点  $V_{\text{Hg}}$  处同时都有相应的电荷分布. 图 1(b) 则清楚地表明在出现空位后, Te 原子的悬挂键一方面使空位第一近邻和第二近邻的 Te—Cd 键的成键电荷与反键电荷相对于距离空位较远的 Te—Cd 键有一

定程度的增加外,在空位点与第一近邻的连线方向上也出现了电荷的增加.(图中的实线为正,表示成键过程中相对原子电荷分布有电荷迁移过来;虚线为负,表示成键过程中相对原子电荷分布有电荷向外迁移.)这说明在空位形成与悬挂键重整过程中,会有 Te 原子的电荷保留在空位间隙处.这样就使得空位点形成局域负电中心,这种负电中心与 Te 离子间的库仑作用力使得 Te 在弛豫过程中向空位点移动. Te 的向内收缩必然导致与之成键的阳离子跟随弛豫,与此同时由于 Hg 空位的出现导致空位第二近邻阳离子的 2 个第二近邻的作用不均衡,也会导致其向空位收缩.而 Si 材料中形成空位时会伴随所谓负 U 的 Anderson 局域行为<sup>[16,17]</sup>,有文献表明,碲镉汞材料在  $x < 0.25$  形成 Hg 空位时也具有类似 Si 材料的 Anderson 局域行为<sup>[18]</sup>,但在本文所计算的组分不会出现这种现象.

表 1 弛豫结果统计(其中弛豫量为相对于空位点的径向原子位移量)

	第一近邻 Te	第二近邻 Cd	第二近邻 Hg	Te <sup>1</sup> -Hg <sup>2</sup>	Te <sup>1</sup> -Cd <sup>2</sup>
弛豫量/nm	-0.0084	-0.0052	-0.0032	-0.0035	-0.0043
变化率/%	-2.9	-1.1	-0.7	-1.2	-1.5

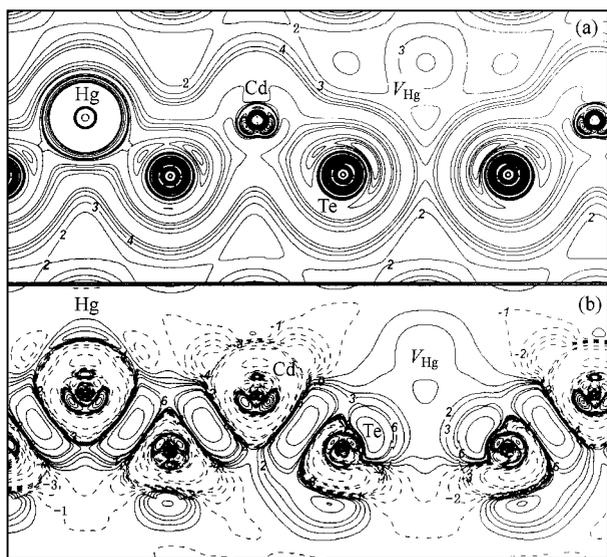


图 1 Hg<sub>0.5</sub>Cd<sub>0.5</sub>Te 存在 Hg 空位缺陷后在第二近邻为 Cd 的(110)面上总的电荷密度(a)和成键电荷密度(b).总的电荷密度的等值线步长为  $5.3 \times 10^{-2} e/nm^3$ ,成键电荷密度的步长为  $1.35 \times 10^{-2} e/nm^3$

图 2 为计算得到的存在空位缺陷与不存在空位缺陷时的态密度对比图.通过态密度与能带结果的计算对比,我们发现 Hg 空位的出现使得价带中 -10—11 eV 附近出现了两个态密度的峰值.根据

能带理论以及分态态密度的计算结果,我们知道该处的峰值来自于阴离子的 5s 态.通过计算不同晶格位置上 Te 的 5s 态态密度发现,这里出现的态密度峰值主要来源于空位第一近邻 Te 的 8 个 5s 态电子的能量向高能端移动 0.55 eV 造成的,如图 3 所示.为了研究造成这种空位第一近邻 Te 原子 5s 态能量移动的主要原因,我们仿照图 1 中的方法计算了 Te 原子 5s 态电子的电荷密度和成键电荷密度,结果如图 4 所示.从图 4(a)中发现,Te 的 5s 态成键后主要分布在 Te 原子与近邻阳离子周围.在不存在空位缺陷具有四面体对称性的情况下,每个 Te 原子的 5s 态电子分布在以 Te 原子为中心的 4 个阳离子方向上.图 4(a)和(b)的计算结果显示,当出现 Hg 空位时,空位第一近邻 Te 的 5s 态电子向剩余的 3 个阳离子近邻集中,这样就使得空位第一近邻 Te 的 5s 态电子分布空间减小,分布在其他 3 个阳离子方向

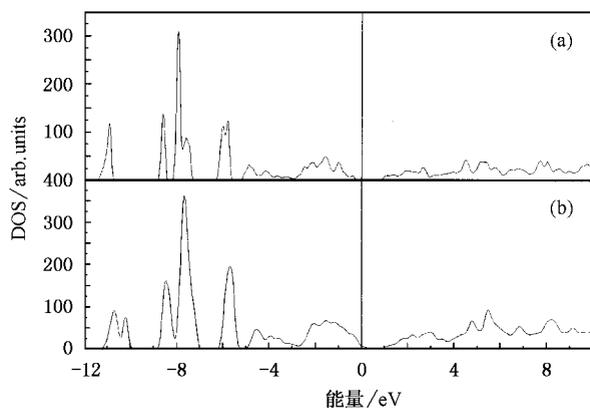


图 2 态密度对比图 (a)Hg<sub>0.5</sub>Cd<sub>0.5</sub>Te 完整材料的总态密度 (b)存在 Hg 空位的 Hg<sub>0.5</sub>Cd<sub>0.5</sub>Te 材料的总态密度.费米能级设为零

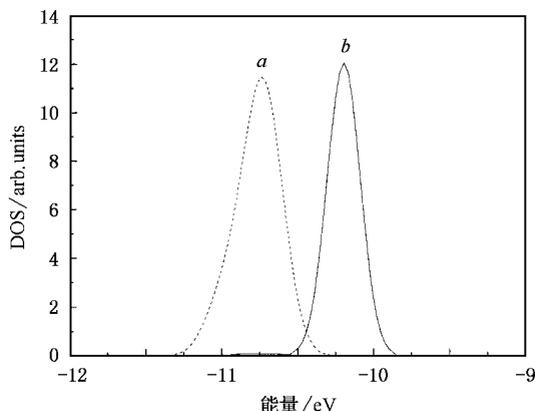


图 3 Hg 空位第一近邻 Te 的 s 态态密度与原胞中与相对空位最远处第七近邻 Te 的 s 态态密度对比.虚线 a 为第一近邻结果,实线 b 为第七近邻结果.费米能级设为零

上的  $5s$  态电荷密度增加  $5s$  态电子的动能也将随之增加,这样就造成如图 3 所示的 Hg 空位第一近邻 Te 的  $5s$  态电子向高能端移动所形成的态密度峰值.

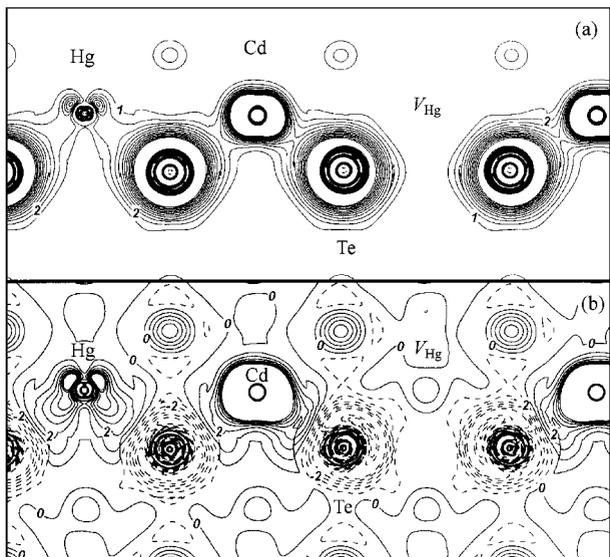


图 4 Te 的  $5s$  态电子的电荷密度 (a) 和成键电荷密度 (b) 电荷密度的等值线步长为  $0.13 \text{ e/nm}^3$ , 成键电荷密度的步长为  $0.06 \text{ e/nm}^3$ .  $V_{\text{Hg}}$  为 Hg 空位出现的晶格位置

根据能带理论可知, II-VI 族半导体材料的价带顶主要表现为阴离子的  $p$  态特性, 而导带底表现为阳离子的  $s$  态特性. 根据以上对 Te 的  $5s$  态的分析可以推测, 带边的类  $p$  态和类  $s$  态同样会有类似 Te 的  $5s$  态那样的能量平移. 对此, 我们计算并对比了第一近邻 Te 的  $p$  态和第七近邻的 Te 的  $p$  态以及第二近邻的 Hg 的  $s$  态和第六近邻的 Hg 的  $s$  态, 结果如图 5、图 6 所示. 由计算比较的结果可知, Te 的  $p$  态在价带顶也有类似于  $5s$  态的能量平移, 造成该能态能量的平移的原因与  $5s$  态相同. 但是阳离子的  $s$  态在导带底没有表现出明显的能态移动, 这主要是因为影响阳离子  $s$  态能量变化的主要原因在于弛豫中的第一近邻与第二近邻的键长变化. 这种键长变化与空位第一近邻悬挂键重构的影响相比较小. 从上述的分析我们暂时可以得到以下结论: Hg 空位缺陷的出现, 将导致碲镉汞材料的能带变小. 由于基于局域密度近似 (LDA) 计算本身的缺陷我们还无法得到准确的带隙减小量, 但是这种带隙变小的趋势是与实验结果相符的<sup>[2]</sup>.

在形成具有四面体对称性的 Hg 空位缺陷后, 第一近邻 Te 与缺陷态相对应的 6 个电子 (每个第一近邻 Te 提供  $3/2$  个缺陷态电子) 中两个占据一重简

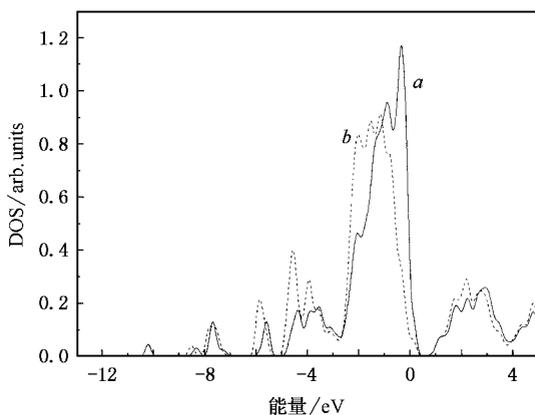


图 5 Hg 空位第一近邻 Te 的  $p$  态态密度与原胞中与相对空位最远处第七近邻 Te 的  $p$  态态密度对比. 实线  $a$  为第一近邻结果, 虚线  $b$  为第七近邻结果. 费米能级设为零

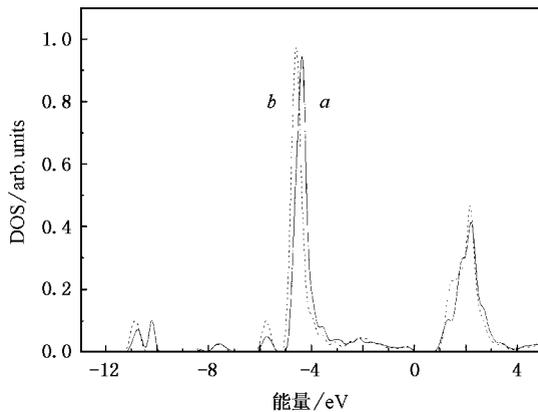


图 6 Hg 空位第二近邻 Hg 的  $s$  态态密度与原胞中与相对空位最远处第六近邻 Hg 的  $s$  态态密度对比. 实线  $a$  为第二近邻结果, 虚线  $b$  为第六近邻的结果. 费米能级设为零

并的  $a_1^s$  态, 剩下的 4 个电子占据三重简并的  $t_2^s$  的两个最低态.  $a_1^s$  态具有  $s$  电子态对称性特征,  $t_2^s$  具有  $p$  态电子的对称特征. 从图 5 可见, 造成带隙变化的主要来源为 Te 的  $p$  态. 图 2 和图 5 中态密度的计算结果表明, 在费米能级以上包含了两个电子态, 它们就是具有  $p$  态电子对称性的两个空的  $t_2^s$  缺陷态. 这就使得 Hg 空位缺陷在碲镉汞材料中将产生两个受主能级, 这两个受主能级的位置可以通过 KS 单粒子本征值的计算得到. 尽管由于 LDA 在带隙计算中存在相应的问题, 但是 LDA 的计算可以比较准确地给出靠近价带顶的能态相对于价带顶的位置. 图 7 给出了中性 Hg 空位以及两次电离情况下两个受主能级位置以及随着电离态的变化受主能级位置的变化, 其中  $V^0$  的一次受主能级位置的计算结果与

文献 [19] 中的实验结果符合得很好. 从图 7 的计算结果中可以明显地看出, 随着电离态的不同, 一级和二级受主能级的位置向带隙内移动, 特别是在二次电离时, 两个受主能级向带隙内移动比较大, 这就使得缺陷能级向深能级转化. 这种随着电离次数受主能级向深能级转化的趋势, 会使得二级受主成为俘获中心而影响碲镉汞材料的输运性能. 实验发现<sup>[18]</sup> 存在 Hg 空位缺陷的 p 型碲镉汞材料的两次受主载流子浓度不同, 二次受主明显小于一次受主. 以上的计算结果说明, 受主能级随着电离次数向深能级转化可能是出现这一实验现象的主要原因. 通过以上对于 KS 单电子能级的分析, 我们同时可以得到这样的结论: Hg 空位缺陷受主能级的出现使得

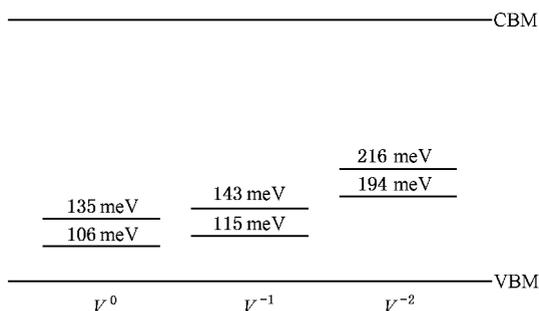


图 7 在不同电离态的情况下 Hg 空位缺陷引起的两个受主能级相对价带顶的变化. 图中  $V^0$ ,  $V^{-1}$  和  $V^{-2}$  分别表示中性、一次电离和二次电离的 Hg 空位. VBM 的能量值设为零

碲镉汞材料的响应波长变长(响应波长主要来自于受主能级与导带底之间的跃迁), 这等效于材料的带隙变小. 这也就是文献 [2] 中指出 Hg 空位缺陷的存在使材料带隙变小的主要原因.

## 4. 结 论

本文利用基于第一性原理的 FP-LAPW 方法研究了 Hg 空位缺陷的存在对红外光电子材料  $\text{Hg}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$  成键机制的影响. 通过类牛顿力学的弛豫方法以及电荷密度、成键电荷密度的计算, 分析了 Hg 空位引起的晶格弛豫. 通过态密度以及空位第一近邻 Te 的  $5s$  态电荷密度以及成键电荷密度的分析, 发现了空位缺陷会造成价带底的 Te 原子  $5s$  态的电子能量向高能端移动, 并分析了造成这种能量移动的原因. 通过对带边 Te 的  $p$  态和阳离子的  $s$  态的分析, 得出了 Hg 空位使碲镉汞材料的响应波长变长、材料的等效带隙变小的结论, 并分析了引起带隙及响应波长变化的主要原因. 通过 KS 单粒子能级的计算得到了 Hg 空位两次受主能级以及受主能级随不同电离态的变化趋势.

本文的计算得到上海超级计算中心提供计算机时保证和技术支持, 在此表示衷心感谢.

[1] Tang D Y 2002 *Papers Collectanea of Tang Ding-Yuan* (Shanghai: Shanghai Scientific and Technological Publisher) p262 (in Chinese) [汤定元 汤定元文选 (上海: 上海科学技术出版社) 第 262 页]

[2] Hu X W, Li X Y, Lu H Q *et al* 1998 *Infrar. Laser Eng.* **27** 48 (in Chinese) 胡新文、李向阳、陆慧庆等 1998 红外与激光工程 **27** 48]

[3] Berding M A, van Schilfgaard M, Paxton A T *et al* 1990 *J. Vac. Sci. Technol.* **A 8** 1103

[4] Berding M A, van Schilfgaard M, Sher A 1993 *J. Electron. Mater.* **22** 1005

[5] Berding M A, Sher A, Chen A B 1990 *J. Appl. Phys.* **68** 5064

[6] Berding M A, van Schilfgaard M, Sher A 1994 *Phys. Rev.* **B 50** 1519

[7] Wei S H, Zhang S B 2002 *Phys. Rev.* **B 66** 155211

[8] Hu X W, Li X Y, Lu H Q *et al* 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 1107 (in Chinese) 胡新文、李向阳、陆慧庆等 1999 物理学报 **48** 1107]

[9] Aguirre M H, Canepa H R, Walsoe de Rea N E 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 5745

[10] Singh D J 1994 *Planwaves, Pseudopotentials and the LAPW Method* (Massachusetts: Kluwer)

[11] Blaha P, Schwarz K, Madsen G *et al* 2001 *WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Wien: Karlheinz Schwarz Techn. Universität)

[12] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865

[13] Kohler B, Wilke S, Scheffler M 1996 *Comp. Phys. Commun.* **94** 31

[14] Blochl P E, Jepsen Q, Andersen O K 1994 *Phys. Rev.* **B 49** 16223

[15] Sun S N, Kiuoussis N, Lim S P 1995 *Phys. Rev.* **B 52** 14421

[16] Baraff G A, Kane E O, Schluter M 1979 *Phys. Rev. Lett.* **43** 956

[17] Baraff G A, Kane E O, Schluter M 1980 *Phys. Rev.* **B 21** 5662

[18] Copper D E, Harrison W A 1990 *J. Vac. Sci. Technol.* **A 8** 1112

[19] Shi S H, Rujirawat S, Ashokan R *et al* 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 638

# First-principles calculations on the mercury vacancy in $\text{Hg}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$ \*

Sun Li-Zhong Chen Xiao-Shuang<sup>†</sup> Zhou Xiao-Hao Sun Yan-Lin Quan Zhi-Jue Lu Wei

( State Key Laboratory for Infrared Physics , Shanghai Institute of Technical Physics , Chinese Academy of Sciences , Shanghai 200083 , China )

( Received 15 July 2004 ; revised manuscript received 11 October 2004 )

## Abstract

Using the density-functional theory within the full-potential linear augmented plane wave method , we have calculated the influence of the mercury vacancy on the bonding mechanism and the relaxation effects in the  $\text{Hg}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$  ( MCT ) alloy . The bonding charge density and charge transfer gave the explanation for the relaxation results . The results of density of states revealed that the re-coupling of the dangling bond of the nearest neighbor ( NN ) of the vacancy make the NN Te 5s state energy level shift up . The reasons for the energy level shift were discussed with the Te s-state bonding charge density . The results of the partial density of state at the band edge reveal that the mercury vacancy will narrow the band gap of the MCT materials .

**Keywords :** HgCdTe , mercury vacancy , full-potential linear augmented plane wave

**PACC :** 7115A , 7155G

---

\* Project supported by the " Hundred Talents Program " of Chinese Academy of Sciences ( Grant No. 200112 ) , the Key Program of the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10234040 , 60476040 , 60221502 ) , the Key Program of the Science and Technology Committee of Shanghai , China ( Grant No. 02DJ14066 ) , the Special Fund for the Information Technology of Shanghai , China ( Grant No. 2003F012 ) , and the State Key Development Program for Basic Research of China ( Grant No. 2001CB610407 ) .

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : xschen@mail.sitp.ac.cn