

B 在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 中掺杂效应的第一性原理研究*

唐冬华 薛林 孙立忠† 钟建新

1) (湘潭大学量子工程与微纳能源技术湖南省高校重点实验室, 湘潭 411105)

2) (湘潭大学材料与光电物理学院, 湘潭 411105)

(2011 年 1 月 25 日收到; 2011 年 5 月 12 日收到修改稿)

基于密度泛函理论的第一性原理方法, 通过形成能和束缚能的计算研究了 B 在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 中的掺杂效应. 结果表明 B 在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 中存在着两种主要形态: 第一种是在完整的 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中 B 稳定存在于六角间隙位置而非替位. 此时, B 形成容易激活的三级施主使材料表现为 n 型. 另一种是在有 Hg 空位存在的 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 中 B 更容易与 Hg 空位结合形成缺陷复合体, 其束缚能达到了 0.96 eV. 这种复合体在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中形成单施主也使材料表现为 n 型. 考虑到辐照损伤形成的 Hg 空位受主, 这种 B 与 Hg 空位的复合体是制约 B 离子在 MCT 中注入激活的一个重要因素.

关键词: 碲镉汞 (MCT), B 掺杂, 第一性原理, 形成能

PACS: 71.55.Gs, 31.15.ae

1 引言

碲镉汞 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, MCT) 是一种重要的红外光电子探测器材料, 由于其禁带宽度随合金组分 x 可以在 0—1.65 eV 范围内连续调控, 从而可以在 1—3 μm , 3—5 μm 和 8—14 μm 三个重要红外大气窗口内工作 [1–3]. 碲镉汞还具有高响应速度、高量子效应、能耗低、少数载流子寿命长等优点被广泛用于制备各种响应波段的红外光探测器和光电导元器件, 在航天遥感等领域有极其重要的作用. 一种半导体材料能否得到广泛的应用主要取决于它是否能可控的进行有效的 p 型和 n 型掺杂 [4]. 掺杂剂的选取主要受到三个方面的限制: 掺杂剂的溶解度、杂质能级位置和补偿效应 [5]. MCT 中掺杂问题也是人们一直关注的问题 [3, 6]. 在碲镉汞材料中进行掺杂形成比较完整的 p-n 结是提高其红外探测精度的关键因素. 液相外延生长、金属有机气相沉积生长、分子束外延生长等 [7–9] 生长技术制备的碲镉汞, 往往由于 Hg 空位缺陷的存在表现

为 p 型材料 [2, 10, 11]. 因此, 在 p 型的碲镉汞材料中进行有效的掺杂使之转变为 n 型材料从而形成完整的 p-n 结具有重要的意义. 碲镉汞材料中形成 p-n 结最常用的方法有离子注入、扩散等方法 [12, 13], 其中离子注入法可以精确控制掺入基片内杂质的浓度, 分布以及注入深度, 从而可以有效控制 p-n 结的位置 [14, 15]. MCT 中离子注入的方式有 H, Be, B 等, H 离子注入 MCT 材料中钝化了 Hg 空位以及有害的线位错, 使材料从 p 型向 n 型转变 [16–18], 但是由于 H 在碲镉汞材料中具有高的扩散系数, 因此很难实现 p-n 结的稳定性. Manchanda 等人最近发现 Be 离子注入在 Hg 空位掺杂的 p 型 MCT 中得到了稳定良好的 n 型区 [19]. 用 B 离子注入 p 型 MCT 中形成 n 型材料一直以来都受到人们的关注 [20]. Baars 等人报道了 B 离子注入 MCT 中 B 受到复合体的束缚而不能被激活, 不是一种有效的施主杂质 [21]. Bahir 等人报道了 B 离子注入 MCT 中在激光退火的条件下 B 被激活 [22]. 众所周知, B 离子注入 MCT 中会产生损伤, 这种损伤对 B 离子激

* 国家自然科学基金 (批准号: 10874143, 10774127), 教育部博士点新教师基金 (批准号: 20070530008) 和湖南省高校创新平台开放基金 (批准号: 10K065) 资助的课题.

† E-mail: lzsun@xtu.edu.cn

活是有影响的, 为了避免损伤带来的影响, Kao 等人采用本征氧化封装避免损伤带来的影响从而使 B 离子的活性得到凸现 [23–25]. Bubulac 等人通过 B 离子注入 MCT 材料后进行热脉冲退火 [26], 以及 B 离子注入两种不同基底生长得到的 MCT 材料后进行退火 [27], 实现了 B 激活, 进而发现离子注入碲镉汞最好性能组分为 $x = 0.2$ [28]. 同时也有 B 离子注入 MCT 中进行高温或者低温退火 B 离子被激活的报道 [29,30]. 尽管 B 离子注入 p 型 MCT 中可以得到高性能的 p-n 结 [31], 但是 B 离子在 n 型区是否是一种有效的施主杂质, 其注入后的杂质形态以及其激活条件成为人们关注的问题 [1,21–30]. 至今, B 离子注入 MCT 中的相关实验讨论颇多, 但 B 在 MCT 中掺杂效应的相关理论研究尚少.

本文基于第一性原理方法分析了 B 在 MCT 材料中的掺杂效应, 研究发现 B 在 MCT 中掺杂的两种主要形态. 第一种是在完整的 MCT 中 B 稳定存在于六角间隙位置而非替位位置. 此时, B 容易与近邻阴离子 Te 成相对较强的共价键, 且 B 在带三个单位正电荷离子型态下最稳定. 结合对 B 六角间隙位置掺杂的态密度的分析, 我们发现 B 在 MCT 中是三级 n 型施主, 并且其三级施主很容易被激活. 第二种是在 MCT 材料中有空位存在的情况下, B 更容易与空位结合形成 n 型缺陷复合体, 此时 B 只表现出一级施主. 因此, B 离子在 MCT 材料中的激活受制于其是否可形成稳定的间隙掺杂及稳定的 B 离子与 Hg 空位的复合体. 本文的研究结果为解释实验上 B 离子注入与激活提供了相应的分析基础.

2 计算细节和计算方法

本文采用基于密度泛函理论的 VASP 软件包 [32], 用超软赝势描述核与电子的相互作用, 采用 Perdew-Wang 91 泛函 [33] 来描述交换关联势. 波函数采用截断能为 335 eV 平面波基组, 布里渊区撒点采用 $5 \times 5 \times 5$ Gamma 的网格撒点. 基于 8 个原子的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 准闪锌矿结构 (包括 4 个 Te 原子, 3 个 Hg 原子, 1 个 Cd 原子) 建立了 $2 \times 2 \times 2$ 的 64 个原子超原胞. 为了能够找到 B 在 MCT 材料中的稳定存在形式, 我们考虑了替位掺杂和间隙掺杂两种情况. 替位掺杂是用一个 B 原子取代超原胞中 (0.5, 0.5, 0.5) 处晶格位置上的 Hg 原子或者 Te 原

子, 间隙掺杂有阳离子和阴离子四面体间隙掺杂以及二元六角 (六角形的角上只有两种元素) 和三元六角 (六角形的角上有三种元素) 间隙掺杂四种. 本文为了进一步分析 B 代 Hg 位掺杂的稳定性, 我们对 B 在 Hg 空位反键位置上与空位形成缺陷复合体进行了计算分析. 为了能与完整材料相对比, 我们同时计算了完整材料的 64 个原子的超原胞. 模拟计算总能的变化以小于 10^{-5} eV (单位晶胞) 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, 我们采用类共轭梯度算法对缺陷引起周围原子的弛豫进行了模拟计算, 弛豫收敛判据为所有原子的受力都小于 0.01 eV/Å.

众所周知, 广义梯度近似计算得到的带隙相对实验值明显偏小, 不能给出杂质能级的准确位置. 为了分析 B 在 MCT 材料中稳定存在的结构以及能级位置, 我们采用了缺陷杂质的形成能和动力学能级 [5,34,35]. 温度为 0K 时, 带电量为 q 的 B 杂质在 MCT 材料中的形成能公式如下:

B 间隙掺杂

$$\Delta H_f(B_\alpha, q) = E(B_\alpha, q) - E(\text{MCT}) - E(\text{B}) + q\mu_e + qE_{\text{VBM}} - \mu_{\text{B}}. \quad (1)$$

B 替位掺杂

$$\Delta H_f(B_\alpha, q) = E(B_\alpha, q) + E(\text{Hg/Te}) - E(\text{MCT}) - E(\text{B}) + q\mu_e + qE_{\text{VBM}} + \mu_{\text{Hg}}/\mu_{\text{Te}} - \mu_{\text{B}}. \quad (2)$$

$\Delta H_f(B_\alpha, q)$ 表示带电为 q 的 B 杂质的缺陷形成能, q 表示带电量, B_α 表示为 $B_{\text{Hg}}, B_{\text{Te}}$ 或者 B_i 间隙缺陷杂质. $E(B_\alpha, q)$ 和 $E(\text{MCT})$ 分别表示带电为 q 的 B 缺陷杂质超胞和完整材料 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 超胞的总能. $E(\text{Hg}), E(\text{Te})$ 和 $E(\text{B})$ 分别为单个 Hg 原子、单个 Te 原子和单个 B 原子的总能. $\mu_{\text{Hg}}, \mu_{\text{Te}}$ 和 μ_{B} 分别为 Hg 原子、Te 原子和 B 原子的化学势. E_{VBM} 表示体系价带顶的能量. 由方程 (1), (2) 可以看出 $\Delta H_f(B_\alpha, q)$ 是 μ_e, q 及原子化学势 μ_α 的函数.

缺陷杂质的动力学能级 $\varepsilon(q/q')$ 是带 q 个电量和带 q' 个电量的缺陷杂质形成能相等时电子化学势 μ_e 所对应的值, B 缺陷杂质的动力学能级公式为

$$\varepsilon(q/q') = [\Delta H_f(B_\alpha, q) - \Delta H_f(B_\alpha, q') + (q' - q)\mu_e] / (q' - q). \quad (3)$$

当 $\Delta H_f(B_\alpha, q) = \Delta H_f(B_\alpha, q')$ 时, 即 $\varepsilon(q/q') = \mu_e$.

为了分析缺陷复合体的稳定性, 我们引入其束缚能^[36]. 束缚能不仅能够描述缺陷复合体形成过程中释放的能量, 而且还能够描述缺陷复合体形成过程中电荷的迁移. **B** 与 **Hg** 空位缺陷复合体的束缚能表达式为

$$E_B = E(V_{\text{Hg}}, q_1) + E(B_i, q_2) - E(\beta, q) - E(\text{MCT}) \\ + q_1 E_{\text{VBM}}^{\text{V}_{\text{Hg}}} + q_2 E_{\text{VBM}}^{B_i} - q E_{\text{VBM}}^{\beta} \\ + (q_1 + q_2 - q) \mu_e, \quad (4)$$

其中 $E(V_{\text{Hg}}, q_1)$, $E(B_i, q_2)$ 和 $E(\beta, q)$ 分别表示带 q_1 个电量的 **Hg** 空位的总能、带 q_2 个电量的 **B** 间隙杂质的总能和带 q 个电量的 β 缺陷复合体的总能. 本文中 β 表示为 **B** 与 **Hg** 空位形成缺陷复合体以及 **B** 在 **Hg** 空位反键位置上与 **Hg** 空位形成缺陷复合体的情况. 由于每个带电的体系为电子化学势 μ_e 的函数, 因此在 (4) 式中我们只考虑了随着电子化学势 μ_e 变化表现最稳定的带电体系. 总能 $E(V_{\text{Hg}}, q_1)$, $E(B_i, q_2)$, $E(\beta, q)$ 和 $E(\text{MCT})$ 是在相同的超胞大小和相同的计算参数下完成的. 由于带电缺陷之间相互作用产生了补偿背景和周期性映像, 我们对带电的缺陷体系的总能进行了修正. 我们使用了 Makov-Payne (M-P) 修正^[37], 修正

公式为 $q^2 \alpha / 2 \epsilon L$, 式中 L 为超胞的边长, ϵ 为介电常数, α 为马德龙常数, q 为超胞所带的电量. 另外, 由于缺陷杂质的存在必然会引起带边结构发生改变以及带隙的变化, 所以用第一性原理计算得到的价带顶 (VBM) 能量不能直接用于 (1)—(4) 式中, 因此我们对缺陷体系计算得到的价带顶 (VBM) 能量进行了修正. 首先我们认为缺陷体系中缺陷最外层平面的势能跟完整材料超胞最外层平面的势能相似, 然后可以得到在缺陷体系中缺陷最外层平面的平均势能 $V_{\text{av}}^{\text{defect}}$ 和完整材料中相应平面的平均势能 $V_{\text{av}}^{\text{perfect}}$. 根据得到缺陷体系的平均势能与完整材料超胞的平均势能, 我们计算它们两者之差进而可以计算出缺陷体系的价带顶的能量, 其公式如下^[38]:

$$E_{\text{VBM}} = E_{\text{VBM}}^{\text{perfect}} + V_{\text{av}}^{\text{defect}} - V_{\text{av}}^{\text{perfect}}, \quad (5)$$

其中 $E_{\text{VBM}}^{\text{perfect}} = E_{\text{T}}(\text{perfect} : 0) - E_{\text{T}}(\text{perfect} : +1)$. $E_{\text{VBM}}^{\text{perfect}}$, $V_{\text{av}}^{\text{defect}}$ 和 $V_{\text{av}}^{\text{perfect}}$ 分别为完整材料 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 价带顶的能量、缺陷杂质的平均势能和完整材料 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 的平均势能. $E_{\text{T}}(\text{perfect}:0)$ 和 $E_{\text{T}}(\text{perfect}:+1)$ 分别为不带电完整材料 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 的总能和带一个单位正电荷完整材料 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 的总能.

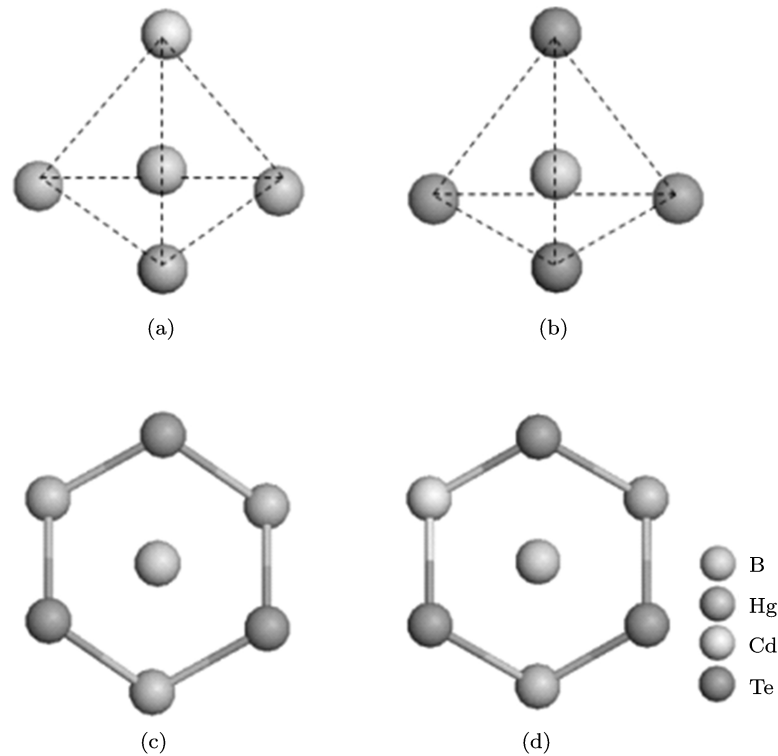


图 1 **B** 在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 中四种间隙结构 (a) 阳离子间隙 B_i^+ ; (b) 阴离子间隙 B_i^- ; (c) 二元六角间隙 $B_i^h(3\text{Hg})$; (d) 三元六角间隙 $B_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$

3 计算结果和讨论

3.1 结构弛豫

B 掺入 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料后, 必然会引起其周围原子弛豫和电子结构变化. 在进行静态自洽计算之前, 我们必须对 B 掺杂的 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料进行结构优化. B 间隙掺杂有四面体和六角间隙掺杂两种: 四面体间隙掺杂分为阳离子四面体间隙掺杂 (四面体的四个顶点都是阳离子, B 在四面体中心, 简写 “ B_i^+ ”) 和阴离子四面体间隙掺杂 (四面体的四个顶点都是阴离子, B 在四面体中心, 简写 “ B_i^- ”) 两种, 六角间隙掺杂也分为二元六角间隙掺杂 (六角形的六个角上只有两种元素, 3 个 Hg 原子, 3 个 Te 原子它们相互交替出现, B 在六角形中心, 简写 “ $\text{B}_i^h(3\text{Hg})$ ”) 和三元六角间隙掺杂 (六角形的六个角上有三种元素, 2 个 Hg 原子, 1 个 Cd 原子, 3 个 Te 原子, 阴阳离子相互交替出现, B 在六角形中心, 简写 “ $\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ ”) 两种. 图 1 为 B 在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 中四种间隙结构图, (a) 为 B_i^+ , (b) 为 B_i^- , (c) 为 $\text{B}_i^h(3\text{Hg})$, (d) 为 $\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$. 我们对 B 间隙掺杂的四种结构进行了结构弛豫, 表 1 为 B 间隙掺杂的结构弛豫统计, 从表中我们可以看到 B 掺入 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中, 会与近邻的 Te 原子形成较强的化学键, 其中 $\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 的 $\text{Te}^1\text{-B}$ 键最短, 键长为 $2.194\text{\AA}$. 根据图 1 的四种结构我们可以看到 B_i^+ , $\text{B}_i^h(3\text{Hg})$, $\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 与 B_i^- 中 B 周围的近邻原子有所不同, 在 B_i^+ , $\text{B}_i^h(3\text{Hg})$, $\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 三种间隙结构中 B 周围的近邻原子有 Te 原子, 而在 B_i^- 中没有. 因此在 B_i^+ , $\text{B}_i^h(3\text{Hg})$, $\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 三种间隙结构中 B 容易与近邻 Te 原子成相对较强的共价键, 且在较强的共价键作用下拉断了近邻的 $\text{Te}^1\text{-Hg}^4$ 键, 如图 2 所示, 发生了明显的弛豫. 从表 1 中可以看到 $\text{Te}^1\text{-Hg}^4$ 键被拉长了 $8.3\%\text{--}20.5\%$, 说明 $\text{Te}^1\text{-Hg}^4$ 键断裂.

同时, 我们也可以看到 B 近邻的阳离子弛豫不明显. 我们对四种间隙掺杂结构以及带不同电荷的状态下进行了优化, 然后进行自洽计算得到其总能, 再根据 (1) 式计算了它们的形成能, 计算结果表明在不同电荷的状态下 $\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 的形成能最低, 即最稳定的掺杂位置 (形成能的详细结果见下文). 图 2 为不带电的 $\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 弛豫后的晶体

结构, 从图中可以看到 B 与三个近邻 Te 原子成相对较强的共价键以及近邻的 $\text{Te}^1\text{-Hg}^4$ 键断裂的现象. 表 2 为带不同电荷的 $\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 结构弛豫统计, 从表中可以看到弛豫后的 $\text{Te}^1\text{-B}$ 键键长基本保持不变, $\text{Te}^1\text{-Cd}^2$ 键键长随正电荷数增加先减小后增加, $\text{Te}^1\text{-Hg}^3$ 键键长随正电荷数增加而缩短, 断裂的 $\text{Te}^1\text{-Hg}^4$ 键键长随正电荷数增加而变得更大. 由此可见, 不同的电荷状态下 B 对第一、二、三、四近邻原子有一定的影响.

表 1 B 间隙的结构弛豫统计表. R 和 R' 表示弛豫前和弛豫后的键长, ΔR 和 $\Delta R'$ 表示键长变化量和键长变化率, 负号和正号表示原子向内和向外弛豫, 键原子的上标表示 B 外层原子次序

缺陷	键	$R/\text{\AA}$	R'	$\Delta R/\text{\AA}$	$\Delta R'/\%$
B_i^+	$\text{Te}^1\text{-B}$		2.441		
	$\text{Te}^1\text{-Cd}^2$	2.884	2.904	0.02	0.69
	$\text{Te}^1\text{-Hg}^3$	2.884	2.953	0.069	2.39
	$\text{Te}^1\text{-Hg}^4$	2.884	3.125	0.241	8.36
B_i^-	$\text{Te}^3\text{-Hg}^1$	2.884	2.897	0.013	0.45
	$\text{Te}^3\text{-Cd}^2$	2.884	2.870	-0.014	-0.49
$\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$	$\text{Te}^1\text{-B}$		2.194		
	$\text{Te}^1\text{-Cd}^2$	2.884	2.959	0.075	2.60
	$\text{Te}^1\text{-Hg}^3$	2.884	3.096	0.212	7.35
	$\text{Te}^1\text{-Hg}^4$	2.884	3.477	0.593	20.56
$\text{B}_i^h(3\text{Hg})$	$\text{Te}^1\text{-B}$		2.247		
	$\text{Te}^1\text{-Hg}^2$	2.884	2.997	0.113	3.92
	$\text{Te}^1\text{-Hg}^3$	2.884	2.981	0.097	3.36
	$\text{Te}^1\text{-Cd}^4$	2.884	3.322	0.438	15.19

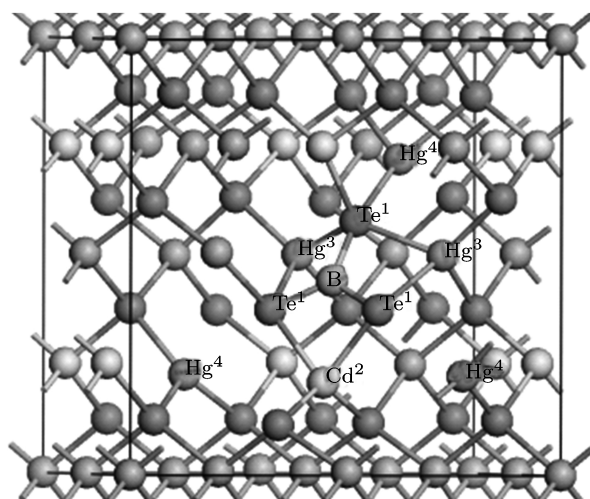


图 2 中性 $\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 杂质的稳定结构

表 2 带不同电荷的 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 结构弛豫统计. 0,1+,2+ 及 3+ 为 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 所带的正电荷数.

R 表示括号里共价键的键长, $\Delta R'$ 表示共价键变化率

$B_i^h(2Hg1Cd)$	$R(Te^1-B)/\text{\AA}$	$(R(Te^1-Cd^2)/\Delta R')/\%$	$(R(Te^1-Hg^3)/\Delta R')/\%$	$(R(Te^1-Hg^4)/\Delta R')/\%$
0	2.194	2.959/2.60	3.096/7.35	3.746/29.89
1+	2.193	2.941/1.98	3.090/7.14	4.032/39.81
2+	2.191	2.946/2.15	3.072/6.52	4.032/39.81
3+	2.193	2.952/2.36	3.065/6.28	4.076/41.33

表 3 B_{Hg}, B_{Te} 和 $(B(AB)+V_{Hg})$ 的结构弛豫统计. R 和 R' 表示弛豫前和弛豫后的键长, ΔR 和 $\Delta R'$ 表示键长变化量和键长变化率, 负号和正号表示原子向内和向外弛豫, 键原子的上标表示 B 外层

原子次序

复合体	键	$R/\text{\AA}$	$R'/\text{\AA}$	$\Delta R/\text{\AA}$	$\Delta R'/\text{\AA}$
B_{Hg}	Te^1-B	2.884	2.358	-0.526	-18.24
	Te^1-Cd^2	2.884	2.964	0.080	2.77
	Te^1-Hg^3	2.884	3.010	0.126	4.37
B_{Te}	$B-Hg^1$	2.884	2.183	-0.701	-24.31
	$B-Cd^2$	2.884	2.288	-0.596	-20.67
	$B-Hg^3$	2.884	4.180	1.296	44.94
	Te^4-Cd^2	2.884	2.938	0.054	1.87
	Te^5-Hg^1	2.884	3.049	0.165	5.72
$B(AB)+V_{Hg}$	Te^1-B		2.192		
	Te^1-Cd^2	2.884	2.956	0.072	2.5
	Te^1-Hg^3	2.884	3.091	0.207	7.18

我们对替位掺杂进行了系统分析. 替位掺杂有 B 代 Hg 位 (B_{Hg}) 和 B 代 Te 位 (B_{Te}) 两种, 表 3 为其结构弛豫统计. 从表中看到 B_{Hg} 与 B_{Te} 原子弛豫有所不同, 在 B_{Hg} 中 B 的四个近邻 Te 原子与 B 成相对较强的共价键, 四个近邻 Te 原子向内弛豫了 18.24%, B 周围的次近邻原子弛豫变化不明显; 在 B_{Te} 中 B 的三个近邻原子 (2 个 Hg 和 1 个 Cd) 向内弛豫较大, 而另一个近邻 Hg 原子向外弛豫较大, 造成这种现象是因为 B 最外层三价电子引起的, B 周围的次近邻原子弛豫也不明显. 根据优化得到的晶体结构, 我们进行了自洽计算, 然后根据 (2) 式我们计算了带不同电荷状态下 B_{Hg} 和 B_{Te} 的形成能 (形成能将在下面进行具体分析), 计算结果表明 B_{Hg} 缺陷比 B_{Te} 更稳定存在于 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 材料中. 为了进一步证明 B_{Hg} 缺陷的稳定性, 我们考虑了 B 在 V_{Hg} 反键位置上与 V_{Hg} 形成复合体 ($B(AB)+V_{Hg}$) 的情况, 使之与 B_{Hg} 缺陷 (可以看做是 B 间隙杂质与 V_{Hg} 的复合体) 进行对照, 其结构弛豫如表 3 所示. 从表 3 中可以看到 B 在 V_{Hg}

反键位置上与第一近邻的 Te 原子形成相当强的键, 而其他的第二近邻和第二近邻原子没有什么变化. 对于两种复合体的稳定性分析见下文.

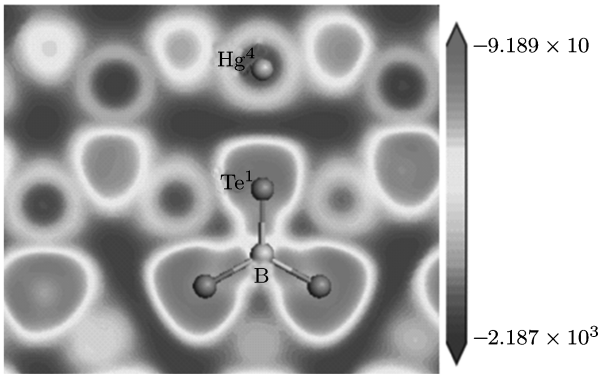


图 3 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 的 ELF 分布图

为了分析 B 掺入 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 材料中体系的成键机理, 我们计算了 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 的电子局域函数 (ELF)^[39,40]. ELF 不是电荷密度的量度, 而是泡利力的量度, 常被用来区分金属键, 共价键和离子键. 两个原子之间成完全共价键的标志是在两个原子之间 ELF 值会出现一个局域的最大值, 这个局域最大值的范围在 0.6—1 之间, 取值大小由共价键的强度来决定; 完全离子键的标志是两个原子核附近的 ELF 值为极值 (一个原子的 ELF 值为 1, 另一个原子的 ELF 值为 0), 在间隙区域 ELF 值最低并且很均匀; 金属键是介于共价键和离子键之间的情况, 通常在间隙区域或多或少会出现 ELF 值在 0.3—0.6 之间的均匀 ELF 分布状态. 图 3 为 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 的 ELF, 我们可以看到 B 与近邻 Te 原子之间的连线上 Te^1 周围的 ELF 值出现了一个局域最大值 (红色部分表示 ELF 值最大), 说明 Te^1-B 键是一个共价键, 且最大的 ELF 值达到了 0.9, 说明 Te^1-B 键是一个非常强的共价键. 从图 2 中可以看到 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 缺陷杂质体系中 Te^1-Hg^4 键断裂的原因是因为 B 掺入 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 材料中与近邻的 Te^1 原子成非

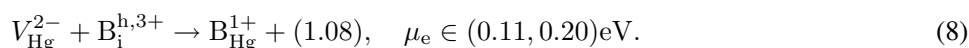
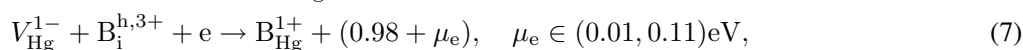
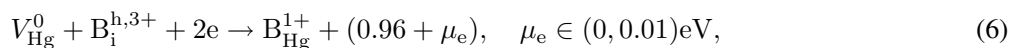
常强的共价键,造成 Te^1 原子的成键电子出现重新分布并集中于 $\text{B}-\text{Te}^1$ 键之间,从而导致 Te^1-Hg^4 键断裂.

3.2 形成能以及束缚能

为了定量分析 B 掺入 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中的最稳定结构以及动力学能级,我们计算了 B 杂质的缺陷形成能. 为了更加准确得到缺陷杂质的形成能和动力学能级,我们对缺陷杂质体系的价带顶 (VBM) 能级进行了修正. $V_{\text{Hg}}, B_{\text{Te}}, B_{\text{Hg}}, B_{\text{i}}$ 以及 B 与 Hg 空位复合体的形成能是电子化学势的函数. 根据 (1) 和 (2) 式我们计算了在富阳离子生长条件下不同电离态缺陷杂质和缺陷复合体的形成能以及动力学能级,如图 4(a) 所示. 图 4(a) 为富阳离子条件下 B 掺杂 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中 $V_{\text{Hg}}, B_{\text{Te}}, B_{\text{Hg}}, B_{\text{i}}^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 以及 $B(\text{AB})+V_{\text{Hg}}$ 缺陷复合体的形成能与电子化学势的函数关系,价带顶 (VBM) 的能级位置设置为. 从图中可以看到 B 杂质进入 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料后 B_{Te} 缺陷形成能最高,说明它最不容易在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中形成;而 B_{Hg} 和 $B_{\text{i}}^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 的形成能较低,在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中比较容易形成,但相对而言带三个单位正电荷 $B_{\text{i}}^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 间隙缺陷的形成能要比带一个单位正电荷 B_{Hg} 缺陷的形成能更低,说明 B 在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中容易形成带三个正电荷的 $B_{\text{i}}^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 间隙掺杂. 同时我们也计算了 B 在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中其他三种间隙位置的形成能, $B_{\text{i}}^c, B_{\text{i}}^a$ 和 $B_{\text{i}}^h(3\text{Hg})$ 的形成能分别为 $-1.10\text{ eV}, -2.04\text{ eV}$ 和 -1.61 eV ,而 $B_{\text{i}}^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 的形成能为 -2.14 eV ,由此可知,B 容易形成六角间隙掺杂, $B_{\text{i}}^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 最稳定.B 在六角间隙时以三价阳离子的形式存在说明 B 在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中激活形成三级施主. $B_{\text{i}}^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 的动力学能级 $\varepsilon(0/+1), \varepsilon(+1/+2)$ 和 $\varepsilon(+2/+3)$, 它们分别是 $0.76\text{ eV}, 0.91\text{ eV}$ 和 0.66 eV ; B_{Hg} 的动力学能级为 $\varepsilon(0/+1)$ 为 0.246 eV , $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料的带隙为 0.14 eV ,由此可见 B 的动力学能级位置位于导

带底 (CBM) 上 0.106 eV 处,说明两种稳定的 n 型掺杂都容易激活,形成 n 型杂质.

从图 4(a) 可以看到 B_{Hg} 缺陷的形成能要比 $B_{\text{i}}^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 缺陷的形成能高,这是因为 B_{Hg} 缺陷的形成能是通过 B 代 Hg 位获得的. 但是在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中有 V_{Hg} 存在的情况下 (在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中 V_{Cd} 和 V_{Te} 的形成能都比 V_{Hg} 的形成能要高很多,说明 V_{Hg} 容易形成, $V_{\text{Cd}}, V_{\text{Te}}$ 和 V_{Hg} 的形成能分别为 $5.13\text{ eV}, 2.88\text{ eV}$ 和 1.79 eV), B_{Hg} 缺陷复合体的形成能比 $B_{\text{i}}^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ 的形成能低了 0.96 eV . 为了定量分析 B_{Hg} 缺陷复合体的稳定性,我们计算了 B_{Hg} 缺陷复合体的束缚能,如图 4(b) 所示. 从图 4(a) 中可以看到在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 带隙范围内随着电子化学势 μ_e 升高 V_{Hg} 稳定存在的电荷态依次为 $V_{\text{Hg}}^0, V_{\text{Hg}}^{1-}$ 和 V_{Hg}^{2-} ,而 B 稳定存在的电荷态始终为 B_{i}^{h3+} , B_{Hg} 缺陷复合体稳定结构的电荷状态始终为 B_{Hg}^{1+} . 我们通过束缚能的计算,可以从图 4(b) 中看到 B_{Hg} 复合体的束缚能高达 0.96 eV ,也就是说, B 很容易与 V_{Hg} 结合形成缺陷复合体. 同时我们也计算了 $B(\text{AB})+V_{\text{Hg}}$ 的束缚能,束缚能为 0.34 eV ,即 B 在 V_{Hg} 反键位置时也比较容易与 V_{Hg} 形成缺陷复合体. 但是, B_{Hg} 缺陷复合体的束缚能要比 $B(\text{AB})+V_{\text{Hg}}$ 缺陷复合体的束缚能要高,因此在 $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ 材料中有 V_{Hg} 存在的情况下比较容易形成 B_{Hg} 缺陷复合体. 从图 4(b) 中看到电子化学势在 $0-0.00958\text{ eV}$ 范围内,中性的 V_{Hg} 与 B_{i}^{h3+} 形成 B_{Hg} 复合体不稳定,容易俘获 $2e$ 形成稳定的 B_{Hg}^{1+} ; 当电子化学势在 $0.00958-0.10575\text{ eV}$ 范围内时,带一个单位负电荷的 V_{Hg} 与 B_{i}^{h3+} 形成 B_{Hg} 复合体也不稳定,需要俘获 e 才能形成稳定的 B_{Hg}^{1+} ; 当电子化学势在 0.11 eV 以上时,带两个单位负电荷的 V_{Hg} 与 B_{i}^{h3+} 形成稳定的 B_{Hg}^{1+} . 从图 4(b) 中看到 B_{Hg} 缺陷复合体和 $B(\text{AB})+V_{\text{Hg}}$ 缺陷复合体的束缚能是正值,说明它们在形成过程中是放热的. 下面三个式子是 V_{Hg} 与 B_{i}^h 形成 B_{Hg} 缺陷复合体的化学反应过程:



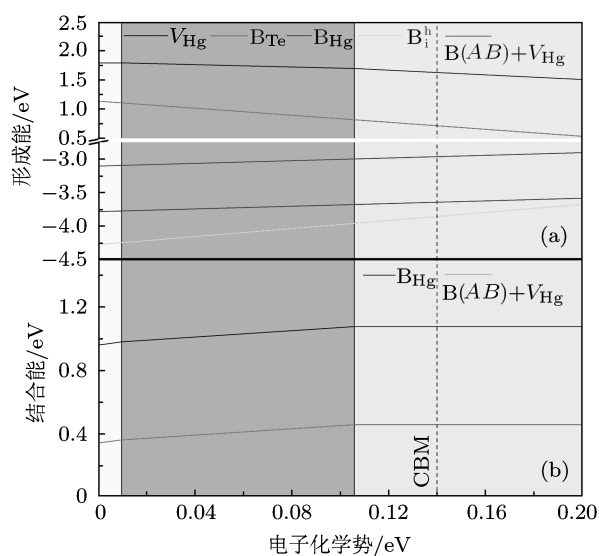


图 4 (a) $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 材料中 Hg 空位, B_{Te} , B_{Hg} , $B_i^h(2Hg1Cd)$ 缺陷以及 $B(AB)+V_{Hg}$ 缺陷复合体的形成能与电子化学势的函数关系; (b) B_{Hg} 缺陷复合体和 $B(AB)+V_{Hg}$ 缺陷复合体的束缚能与电子化学势的关系. 价带顶 (VBM) 设置为 0

三个化学反应式子中括号内表示反应过程中释放的热量, 从中可以看到随着电子化学势升高, 释放的热量越来越高, 也就是说 B_i^h 与 V_{Hg} 缺陷靠近时容易形成 B_{Hg} 缺陷复合体, 这是与实验相符的 [22]. 从 (6) 式中可以看到, 当电子化学势靠近 VBM 时, $B_i^{h,3+}$ 与 V_{Hg} 缺陷形成 B_{Hg}^{1+} 缺陷复合体需要俘获 2 个少数载流子电子, 以致少数载流子浓度减小. 少数载流子浓度的减小直接增加了少数载流子的迁移率和寿命. 从 (7) 式中可以看到, 随着电子化学势靠近 CBM 时, $B_i^{h,3+}$ 与 V_{Hg}^{1-} 缺陷形成 B_{Hg}^{1+} 缺陷复合体需要俘获 e. 这个 e 是来自于多数载流子, 即减小了 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 材料中多数载流子的浓度. 结合形成能和束缚能的分析, 考虑到辐照损伤会形成大量的 Hg 空位, B 与 Hg 空位形成 B_{Hg} 缺陷复合体是制约 B 离子注入激活的一个重要因素.

3.3 态密度

通过形成能的计算我们可以看到 B 在 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 半导体材料中稳定掺杂位置是三元六角间隙位置 $B_i^h(2Hg1Cd)$, 所以我们计算了三元六角间隙位置 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 的态密度, 如图 5 所示. 图 5(a) 为完整材料 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 的总的态密度, (b) 为 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 间隙杂质的总的态密度.

我们可以看到 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 间隙缺陷的费米能级在导带里, 即 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 间隙缺陷具有 n 型掺杂的特征. 我们都知道完整材料 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 的态密度大致可分为六个区域, 如图 5(a) 中所标记的 p_1 — p_6 六个区域 [41]. 完整材料 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 的 p_1 为来自 Te 原子的 5s 态在成键过程中形成的芯态的局域态; p_2 由四个峰组成, 它们是来自 Hg 和 Cd 的 d 轨道在自旋轨道作用下分裂出来的四个态; p_3 由两个峰组成, 它们是来自于阳离子 s 态和阴离子 p 态 s-p 轨道杂化所形成的成键局域态; p_4 是来自于阳离子 s 态和阴离子 p 态 s-p 轨道杂化所形成的成键延展态; p_5 和 p_6 分别是来自于阳离子 s 态和阴离子 p 态 s-p 轨道杂化所形成的反键局域态和反键延展态. 同时, 我们可以从总体上看到 $B_i^h(2Hg1Cd)$

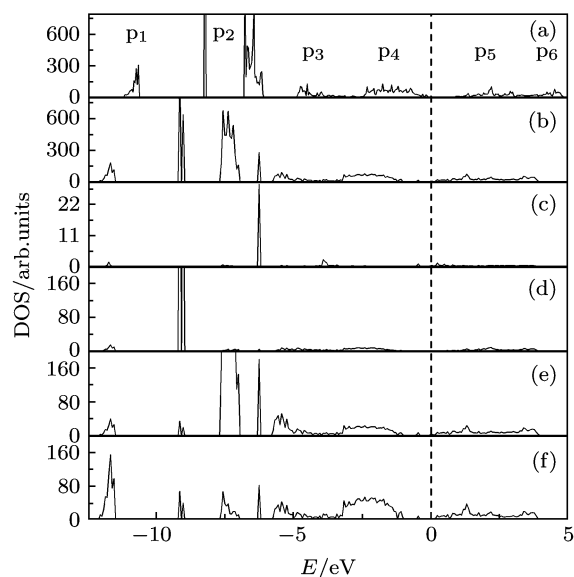


图 5 (a) 为 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 完整材料的总的态密度; (b) 为 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 六角间隙缺陷杂质的总的态密度; (c), (d), (e) 和 (f) 为 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 六角间隙缺陷中每一类原子的总的态密度, 其中 (c) 为 B, (d) 为 Cd, (e) 为 Hg, (f) 为 Te. 图中费米能级设为 0

间隙杂质与完整材料 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 的总的态密度分布是相同的, 即 p_1 态主要来由 Te 原子的 s 态贡献, p_2 态主要由 Hg 和 Cd 原子的 d 态贡献, p_3, p_4, p_5 和 p_6 都是来自于阳离子 s 态和阴离子 p 态贡献. 但是 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 间隙杂质与完整材料 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 的总的态密度不同之处是在 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 间隙杂质中出现了两个新的态密度峰, 这两个峰分别位于能量为 -9.02 eV 和 -6.25 eV 处. 为了分析两个新的态密度峰产生的原因以及

每类原子对 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 的总的态密度的贡献, 我们计算了 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 中每类原子的总的态密度, 如图 5(c),(d),(e),(f) 所示. 图 5(c),(d),(e),(f) 分别为每类原子 B, Cd, Hg 及 Te 的总的态密度, 从图中可以看到在 -9.02 eV 处出现的新的态密度峰主要来自 Hg, Cd 和 Te 三个原子的 d 轨道电子, 这是因为 B 掺入 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 材料后 B 引起周围的 Hg, Cd 和 Te 原子产生了畸变, 致使 Hg, Cd 和 Te 杂化轨道电子的能量发生变化. 在 -6.25 eV 处出现的新的态密度峰主要来自 B, Hg 和 Te 三个原子的轨道电子, 这也是因为 B 自身与 Hg, Te 原子作用产生了杂化轨道电子. 因此, 出现两个新的态密度峰是 B 掺入 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 材料后 B 杂质作用所致.

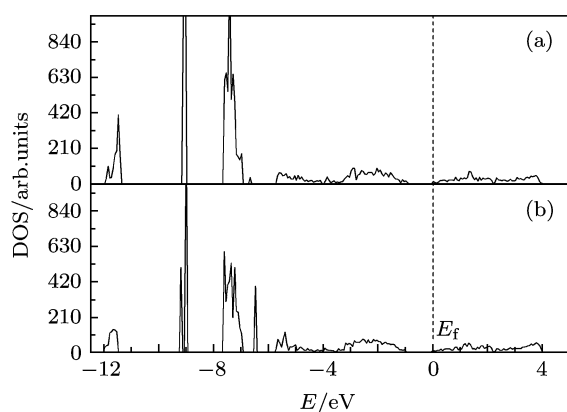


图 6 缺陷复合体 (a) B_{Hg} , (b) $B(AB)+V_{Hg}$ 的态密度 (费米能级设为 0)

实际上, 在生长的 MCT 材料中存在着 Hg 空位受主, 这种 Hg 空位对 B 激活是有影响的, 因此我们必须考虑 B 与 Hg 空位形成缺陷复合体的情况. 我们计算了 B 与 Hg 空位 (B_{Hg}) 以及 $B(AB)+V_{Hg}$ 形成缺陷复合体的总的态密度, 如图 6 所示. 从图中我们可以看到缺陷复合体的费米能级进入了导带, 因此 B_{Hg} 和 $B(AB)+V_{Hg}$ 缺陷复合体依然具有 n 型掺杂的特征. 图 6(a) 中 B_{Hg} 的总的态

密度分布与完整材料 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 基本一致, 说明 B_{Hg} 中每类原子对体系的贡献也与完整材料 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 基本一致. 与 B 六角间隙掺杂相比, 我们可以看到在 -9.02 eV 处没有出现新的态密度峰值, 这是因为 B 与 Hg 位缺陷复合体中 B 近邻原子都是 Te 原子没有了 Hg 和 Cd 原子, 以致 B 只与近邻的 Te 原子作用, 从图中可以看到 Te 的 5s 态在 B 杂质的作用下分裂成两个态密度峰值. 从图 6(b) 中可以看到 $B(AB)+V_{Hg}$ 的总的态密度和 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 的总的态密度分布基本一致, 在 -9.02 eV 和 -6.25 eV 处出现了两个新的态密度峰值, 其产生机理与 $B_i^h(2Hg1Cd)$ 的情况基本一致.

4 结论

我们采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 分析了 B 在 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 材料中的掺杂效应. 通过形成能和束缚能的计算, 我们发现 B 在 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 中存在着两种主要形态: 第一种是在完整的 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 材料中 B 稳定存在于六角间隙位置而非替位, B 在 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 材料中表现为三级施主. $B_i^h(2Hg1Cd)$ 的弛豫结果可以看到 B 近邻的 Te^1-Hg^4 键断裂, 通过 ELF 的计算, 发现 B 掺入 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 中与三个近邻阴离子 Te 形成相对较强的共价键, 以致打破了 B 近邻的 Te^1-Hg^4 键. 另一种是在有 Hg 空位存在的 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 中 B 更容易与 Hg 空位结合形成缺陷复合体, 其束缚能达到了 0.96 eV. 这种复合体在 $Hg_{0.75}Cd_{0.25}Te$ 材料中形成单施主也使材料表现为 n 型. 因此, B 离子在 MCT 材料中的激活受制于其是否可形成稳定的间隙掺杂及稳定的 B 离子与 Hg 空位的复合体.

- [1] Chen G B, Lu W, Cai W Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3 (in Chinese) [陈贵宾, 陆卫, 蔡炜颖 2004 物理学报 **53** 3]
- [2] Sun L Z, Chen X S, Zhou X H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4 (in Chinese) [孙立忠, 陈效双, 周孝好 2005 物理学报 **54** 4]
- [3] Han J L, Sun L Z, Chen X S, Lu W, Zhong J X 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2 (in Chinese) [韩金良, 孙立忠, 陈效双, 陆卫, 钟建新 2010 物理学报 **59** 2]
- [4] Neumark G F 1997 *Mater. Sci. Eng. R* **21** 1

- [5] Wei S H, Zhang S B 2002 *Phys. Rev. B* **66** 155211
- [6] Shao J, Lü X, Guo S L, Lu W 2009 *Phys. Rev. B* **80** 155125
- [7] Tennant W E, Cockrum C A, Giplin J B, Kinch M A, Reine M A, Ruth R P, Vac J 1992 *Sci. Technol. B* **10** 1359
- [8] Huang S H, He J F, Chen J C, Lei C H 2001 *Chinese Journal of Semiconductors* **22** 2 (in Chinese) [黄仕华, 何景福, 陈建才, 雷春红 2001 半导体学报 **22** 5]
- [9] Yue F Y, Chen L, Li Y W, Hu Z G, Sun L, Yang P X, Chu J H 2010

- Chin. Phys. B* **19** 11 117106
- [10] Berding M A, Sher A, Chen A B 1990 *J. Appl. Phys.* **68** 5064
- [11] Brding M A, van Schilfgaarde M, Sher A 1994 *Phys. Rev. B* **50** 1519
- [12] Reine M B, Sood A K, Tredwell T J 1981 *Semiconductors and Semimetals* vol **18** ed Willardson R K and Beer A C (Now York:Academic) p246
- [13] Chen G B, Li Z F, Cai W Y, He L, Hu X N, Lu W, Shen X C 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 6 (in Chinese) [陈贵宾, 李志锋, 蔡伟颖, 何力, 胡晓宁, 陆卫, 沈学础 2003 物理学报 **52** 6]
- [14] Destefanis G L 1983 *Nucl. Instr. Methods* **209/210** 567
- [15] Destefanis G L 1988 *J. Cryst. Growth* **86** 700
- [16] Kim Y H, Kim T S, Redfern D A, Musca C A, Lee H C, Kim C K 2000 *J. Electron. Mater.* **29** 6
- [17] White J, Pal R, Dell J M, Musca C A, Antoszewski J, Faraone L, Burke P 2001 *J. Electron. Mater.* **30** 6
- [18] Golding T D, Hellmer R, Bubulac L, Dinan J H, Wang L, Zhao W, Carmody M, Sankur H O, Edwall D 2006 *J. Ele-ctron. Mater.* **35** 6
- [19] Manchanda R, Sharma R K, Malik A, Pal R, Dhaul A, Dutt M B, Basu P K, Thakur O P 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 116102
- [20] Kumar R, Dutt M B, Nath R, Chander R, Gupta S C 1990 *J. Appl. Phys.* **68** 5564
- [21] Baars J, Hurrle A, Rothmund W, Fritzsche C R, Jakobus T 1982 *J. Appl. Phys.* **53** 1461
- [22] Bahir G, Kalish R, Nemirovsky Y 1982 *Appl. Phys. Lett.* **41** 1057
- [23] Kao T M, Sigmon T W 1986 *Appl. Phys. Lett.* **49** 464
- [24] Kao T W, Sigmon T W, Bubulac L O 1987 *J. Vac. Sci. Technol. A* **5** 3175
- [25] Kao T M, Sigmon T W 1987 *Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. B* **21** 578
- [26] Conway K L, Opyd W G, Greiner M E, Gibbons J F, Sigmon T W, Bubulac L O 1982 *Appl. Phys. Lett.* **41** 750
- [27] Bubulac L O 1985 *Appl. Phys. Lett.* **46** 976
- [28] Bubulac L O 1988 *J. Cryst. Growth* **86** 723
- [29] Wu T B, Lam K Y, Chiang C D, Gong J, Yang S J 1988 *J. Appl. Phys.* **63** 4986
- [30] Talipov N Kh, Ovsyuk V N, Remesnik V G, Vasilyev V V 1997 *Mater. Sci. and Eng. B* **44** 266
- [31] Lanir M, Wang C C, Vanderwyck A H B 1978 in *IEDM Tech. Dig.* p421
- [32] VASP Group, Theoretical Physics Department, Vienna, Austria. Full documentation available online at <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/Welcome.html>
- [33] Perdew J P, Burkeand K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [34] Sun L Z, Chen X S, Zhao J J 2007 *Phys. Rev. B* **76** 045219
- [35] Zhang S B, Northrup J E 1991 *Phys. Rev. B* **67** 2339
- [36] Pöykkö S, Chadi D J 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1231
- [37] Makov G, Payne M C 1995 *Phys. Rev. B* **51** 4014
- [38] Tanaka T, Matsunaga K, Ikuhara Y, Yamamoto T 2003 *Phys. Rev. B* **68** 205213
- [39] Blochl P E, Jepsen Q, Andersen O K 1994 *Phys. Rev. B* **49** 16223
- [40] Becke A D, Edgecombe K E 1990 *J. Chem. Phys.* **92** 5397
- [41] Wei S H, Zunger A 1991 *Phys. Rev. B* **43** 1662

Doping effect of boron in $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$: first-principles study*

Tang Dong-Hua Xue Lin Sun Li-Zhong[†] Zhong Jian-Xin

1) (*Laboratory for Quantum Engineering and Micro-Nano Energy Technology Xiangtan 411105, China*)

2) (*Faculty of Materials, Optoelectronics and Physics of Xiangtan University, Xiangtan 411105, China*)

(Received 25 January 2011; revised manuscript received 12 May 2011)

Abstract

Using the first-principles method based on the density functional theory, we study the doping effect of B impurity in HgCdTe (MCT). We find that the most stable configuration of the impurity is at the B hexagonal interstitial position, rather than at the in-situ substitution. The electronic structures and the density of states of B hexagonal interstitial doped MCT are systematically investigated. Near neighbour (NN) and next-near-neighbor (NNN) atoms around the B impurity are obviously relaxed. The relaxation induces the breaking of NN Te-Hg covalent bond. Moreover, B hexagonal interstitial behaves as triple n-type dopant. The charged state analysis indicates that $\text{B}_i^h(2\text{Hg}1\text{Cd})$ with three positive charges is most stable and forms an efficient donor. However, as long as the Hg vacancy exists, complex impurity between Hg vacancy and B impurity can be easily formed, its binding energy reaches up to 0.96 eV. Such complex behaves as single n-type dopant. Considering radiation damage of B ion implantation, the complex is a main factor restricting the activation of B ion in MCT.

Keywords: mercury cadmium telluride(MCT), B doping, formation energy, first-principles study

PACS: 71.55.Gs, 31.15.ae

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant Nos.10874143,10774127),the Doctoral Fund of Ministry of Education of China(Grant No.20070530008), and the Scientific Research Fund of Hunan Provincial Education Department(Grant No.10K065).

[†] E-mail: lzsun@xtu.edu.cn