

碘化铟晶体本征缺陷的第一性原理研究*

张伟¹⁾ 徐朝鹏¹⁾ 王海燕^{2)†} 陈飞鸿¹⁾ 何畅³⁾

1) (燕山大学信息科学与工程学院, 河北省特种光纤与光纤传感重点实验室, 秦皇岛 066004)

2) (燕山大学环境与化学工程学院, 河北省应用化学重点实验室, 秦皇岛 066004)

3) (圣路易斯大学工业工程学院电子与计算机工程系, 美国圣路易斯 63103)

(2013年7月30日收到; 2013年9月16日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 对正交碘化铟 (InI) 晶体可能存在的 6 种本征点缺陷 (碘空位、铟空位、碘占铟位、铟占碘位、碘间隙、铟间隙) 结构进行优化。通过缺陷形成能的计算, 得出各缺陷在生长过程中形成的难易程度; 通过态密度的计算, 分析出各种缺陷能级位置及其对载流子传输的影响。结果表明: 最主要的低能缺陷铟间隙会引入复合中心和深空穴陷阱, 前者降低少数载流子的寿命, 后者俘获价带的空穴而降低空穴的迁移率-寿命积。计算结果为实验中提高 InI 晶体载流子的迁移率-寿命积提供理论指导, 对获得性能优异的 InI 核辐射探测材料有重要帮助。

关键词: 碘化铟, 形成能, 缺陷能级, 深空穴陷阱

PACS: 31.15.es, 71.15.Mb, 71.20.Nr, 71.15.Nc

DOI: 10.7498/aps.62.243101

1 引言

室温半导体核辐射探测器是 20 世纪 60 年代以来得到迅速发展的一种新型核辐射探测元件, 与气体探测器和闪烁计数器相比具有探测效率高、能量分辨率好、体积小、携带方便等许多优点, 在环境监测、核医学、工业无损检测、安全检查、核武器突防、航空航天等领域具有广泛而重要的用途 [1,2]。

碘化铟 (InI) 晶体是一种极有前途的室温核辐射探测器材料 [3], 它具有较大的原子序数 ($Z_{\text{In}} = 49$, $Z_{\text{I}} = 53$) 和较高的密度 (5.31 g/cm^3), 确保对 γ 射线有较高的阻抗能力, 从而保证探测器具有较高的探测效率; 它具有较大的禁带宽度 (约为 2 eV) 和很高的电阻率 (约为 $10^{11} \Omega \cdot \text{cm}$) [4], 保证探测器在室温工作时有较低的漏电流; InI 晶体的载流子迁移率-寿命积 ($\mu\tau$) 也很大 (其电子的 $\mu\tau$ 值为 $7.2 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{V}$), 确保探测器具有良好的能量分辨率。相比目前用于辐射探测器的其他化合物半导体中的元

素, 如 CdTe 中的 Cd 元素、HgI₂ 中的 Hg 元素以及 GaAs 中的 As 元素, In 和 I 的毒性要低 [5], 因此 InI 成为近年来重点研究的室温核辐射探测器的新材料之一。

国外关于 InI 的研究主要集中在晶体生长和探测器试制方面。1955 年, Jones 和 Templeton^[4] 在 300 °C 下通过加热 In 和稍微过量 I 的方法合成了碘化铟单晶, 并且分析了碘化铟的晶体结构。1956 年, Peretti^[6] 完成了 In-I 系统相图的绘制。1972 年, Levy 和 Mooser^[7] 研究了碘化铟单晶在低温下的光谱。1978 年, Ohno 等^[8] 通过升华法合成了碘化铟单晶, 并且测试了反射光谱。1979 年, Nakamura 等^[9] 利用气相法在玻璃安瓿中成功生长出了碘化铟晶体。之后很长一段时间, 由于提纯技术以及生长技术的制约, 碘化铟晶体的研究并没有大的进展。1992 年, Shah 等^[10] 利用垂直布里奇曼法生长出碘化铟单晶, 其电阻率为 $10^{11} \Omega \cdot \text{cm}$ 量级。但其制备周期太长, 生长速率仅为 5 mm/d。1993 年, Kolinko^[11] 对碘化铟晶体的能带结构进行了计算, 证实了碘化铟晶

* 河北省应用基础研究计划重点基础研究项目 (批准号: 13961103D) 和中国电子科技集团公司第四十六研究所创新基金 (批准号: CJ20120208) 资助的课题。

† 通讯作者。E-mail: hywang@ysu.edu.cn

体结构是类碘化铊 (TII) 结构, 而且具有与 TII 类似的态分布。2006 年, Onodera 等^[12] 利用移动熔区法 (TMZ) 以 5 mm/h 的速度生长出直径约 1 mm 的碘化铟晶体, 其电阻率只有 $10^9 \Omega \cdot \text{cm}$ 。2011 年, 美国伊利诺伊理工大学的 Nicoara 等^[13] 用 Czochralski 法生长出直径为 6 mm 的碘化铟晶体, 但电阻率也不高, 只有 $10^9 \Omega \cdot \text{cm}$ 。就目前研究而言, 生长出的 InI 晶体质量不高, 原因在于化合物半导体单晶在制备过程中往往会引入较多的本征缺陷, 本征缺陷会俘获和散射载流子进而降低载流子的 $\mu\tau$ 值^[14], 影响载流子的传输。实验进行缺陷的研究具有局限性, 因此原子层次的模拟就显得尤为重要。关于 InI 本征缺陷对于载流子传输的影响机理鲜见报道, 因此, 有必要对 InI 的本征缺陷进行深入研究, 阐明不同的缺陷对于载流子传输和 $\mu\tau$ 值的影响机理。

本文利用基于密度泛函理论 (DFT) 的平面波赝势法, 从态密度的角度对 InI 六种本征点缺陷的电子结构进行研究, 包括碘空位 (V_I)、铟空位 (V_{In})、碘占铟位 (I_{In})、铟占碘位 (In_I)、碘间隙 (I_i)、铟间隙 (In_i)。首先对 InI 6 种本征点缺陷的模型进行结构优化, 得到各缺陷情况下最稳定的原子构型, 然后通过优化后的总能计算出各缺陷的形成能, 从而得知各缺陷在生长过程中形成的难易程度, 再通过对理想和本征点缺陷下 InI 晶体的总态密度的对比分析, 确定各缺陷能级位置及电子占据情况, 结合各缺陷的分态密度分析了各缺陷能级的形成。

2 计算方法与物理模型

2.1 计算方法

本文采用 DFT 平面波赝势方法, 运用 Materials Studio 5.0 计算软件中的 CASTEP^[15,16] 模块进行计算和分析。计算中, 采用广义梯度近似 (GGA) 下 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 泛函^[17] 来描述交换关联能, 选择超软赝势 (ultrasoft pseudopotential) 来描述电子与离子的相互作用, 选取 In, I 各原子的价电子组态为 In 4d¹⁰5s²5p¹, I 5s²5p⁵, 平面波截断能取为 450 eV, 第一布里渊区按 $6 \times 6 \times 6$ 进行分割。在超胞尺寸保持不变^[18] 的情况下, 采用 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno 算法对缺陷结构进行了结构优化, 收敛条件为每个原子的能量变化在 1.0×10^{-5} eV 以内, 原子最大受力不超过 $0.3 \text{ eV} \cdot \text{nm}^{-1}$, 最大压力不超过 0.05 GPa, 最大位移不超过 1.0×10^{-4} nm, 获得优化后的晶胞结构再进一步计算电子结构性质。

2.2 物理模型

InI 是正交晶系, 类似 TII 结构, 空间群为 $Cmcm(63)$, 晶格常数为 $a = 0.475 \text{ nm}$, $b = 1.276 \text{ nm}$, $c = 0.491 \text{ nm}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 。本文在计算中采用 $2 \times 2 \times 3$ 个原胞组成的超胞作为完整晶体的计算单元, 该超胞由 12 个 InI 原胞组成, 总原子个数为 48 个。由于体系采用周期边界条件, 考虑晶体中本征点缺陷的形成浓度比较小, 为避免缺陷距离太近导致的相互作用影响, 本文只研究每个超胞中存在单个点缺陷的情况。

在理想 InI 晶体结构中, 每一个原子和周围五个异类原子构成五面体结构。进行空位 (反位) 缺陷计算时用空位 (反位) 原子替换五面体内部的原子, 如图 1 所示, V_I (V_{In}) 表示黑色球处的 I (In) 原子被去掉, 白色球为 In (I) 原子; I_{In} (In_I) 表示黑色球处的 In (I) 原子位置被 I (In) 原子占据, 白色球为 I (In) 原子。对于间隙缺陷, 存在同类 (异类) 原子的分裂间隙^[19] 位置和同类 (异类) 原子的中间间隙位置。为得到能量最低时的晶体结构, 通过对处于不同位置的两种间隙原子的多种结构进行优化, 发现碘间隙 (I_i) 以 I 原子的分裂间隙形式存在时最稳定, 而铟间隙 (In_i) 以两个 I 原子的中间间隙形式存在时最稳定, 如图 2 所示, 图中只给出了间隙原子和其邻近的部分原子。

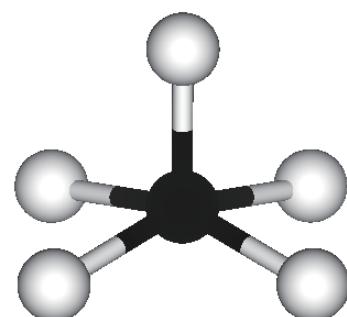


图 1 空位及反位缺陷模型示意图

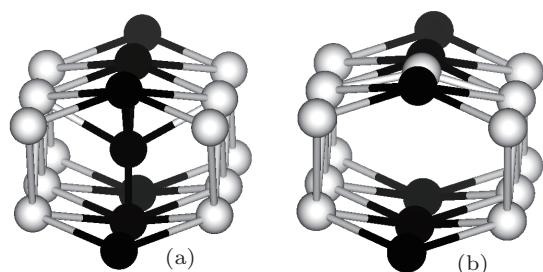


图 2 间隙原子位置示意图 (a) 碘间隙; (b) 铟间隙

3 结果与讨论

3.1 理想 InI 晶体的电子结构

为了得到可靠的计算结果, 更好地对理想和本征点缺陷下 InI 晶体的电子结构进行对比分析, 首先利用局域密度近似 (LDA), GGA-PBE 和 GGA-PW91 三种方法对 InI 超胞进行几何结构优化, 所得晶格参数、带隙与实验值的比较如表 1 所示. 可以看出 LDA 计算所得晶格参数中的 c 值偏小, 而 GGA 下 PBE 和 PW91 方法计算所得的晶格参数都很好地符合实验值^[5,11], 表明采用 GGA 计算方法是合理可靠的. 但是 PBE 算出的带隙 (E_g) 更接近实验值, 自由能更低, 因此本文选择了 GGA-PBE 方法对体系进行结构优化和电子性质的计算.

表 1 三种方法优化后 InI 的晶格常数、带隙与实验值^[5,11] 比较

	a/nm	b/nm	c/nm	E_g/eV	自由能/eV
LDA	0.462	1.273	0.469	1.121	-44765.2
GGA-PBE	0.478	1.289	0.496	1.664	-44997.9
GGA-PW91	0.480	1.294	0.495	1.534	-44902.3
实验值	0.475	1.276	0.491	2.010	—

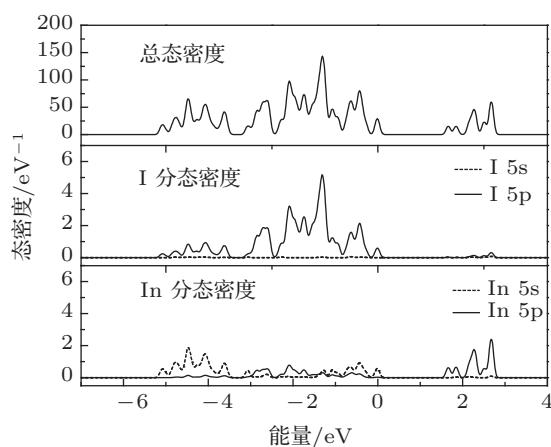


图 3 理想 InI 的总态密度和原子 I, In 的分波态密度图

图 3 为理想 InI 晶体的总态密度和原子 I, In 的分态密度. 可以看出, InI 价带的低能端部分 (-5.20 — -3.45 eV) 由 I 5p 和 In 5s 态电子共同贡献, 高能端的价带部分 (-3.14 — 0 eV) 主要由 I 5p 态电子决定, 且 In 5s 和 In 5p 态电子均有较小的贡献. 导带态密度的能量范围为 1.52 — 2.81 eV, 主要由 In 5p 态电子决定. 能带结构图 (图 4) 显示价带最高点和导带最低点位于布里渊区中心 G 点, 说明

InI 属于典型的直接带隙半导体, 与 Kolinko^[11] 报道的结果一致. 此外, 计算所得 $E_g = 1.664$ eV, 较实验值偏低, 这与 GGA 带隙计算值普遍偏低有关^[20,21], 但这并不影响对 InI 及其缺陷体系电子结构和性质的理论分析.

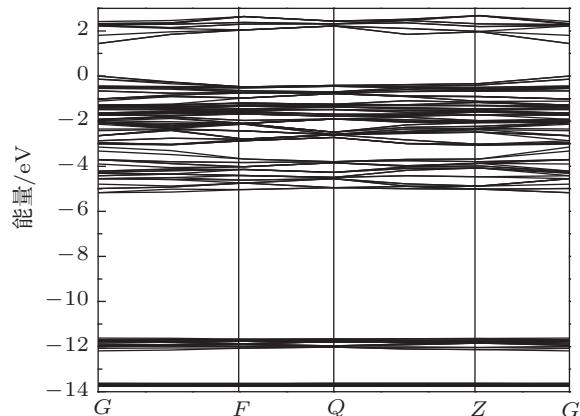


图 4 理想 InI 的能带结构图

3.2 体系形成能计算

如果超胞中有原子的得失, 而且整个体系带有电荷, 其缺陷形成能受原子化学势和电子化学势的影响, 缺陷形成能总表达式^[22] 为

$$E_F = E_{\text{def}} - E_{\text{per}} - \sum_i n_i \mu_i + q(E_v + \mu_e), \quad (1)$$

式中 E_{def} 为带缺陷的超胞的总能, E_{per} 为完美超胞的总能, n_i 为超胞中增加或去除 i 原子的个数 (增加为正, 去除为负), μ_i 为 i 原子的化学势, E_v 为价带顶能量, μ_e 为电子化学势, 即费米能级. 在 (1) 式中 μ_i 所对应的 μ_{In} 和 μ_{I} 通常是不能得到的, 但是 μ_{In} 和 μ_{I} 满足以下关系:

$$\mu_{\text{In}} + \mu_{\text{I}} = \mu_{\text{InI(bulk)}}, \quad (2)$$

$$\mu_{\text{InI(bulk)}} = \mu_{\text{In(bulk)}} + \mu_{\text{I(bulk)}} + \Delta H(\text{InI}), \quad (3)$$

$\mu_{\text{InI(bulk)}}$, $\mu_{\text{In(bulk)}}$, $\mu_{\text{I(bulk)}}$ 分别为理想 InI 体单晶的化学势、固态金属 In 的化学势、I₂ 单质中 I 原子的化学势, 都可以通过计算得到; $\Delta H(\text{InI})$ 为 InI 的形成焓 (对于稳定的物质为负值), 计算值为 -0.96 eV, 与实验值 -1.21 eV^[23] 相吻合. 在富 In 的生长环境下, $\mu_{\text{In}} = \mu_{\text{In(bulk)}}$, 由 (2) 和 (3) 式可得 $\mu_{\text{I}} = \mu_{\text{I(bulk)}} + \Delta H(\text{InI})$; 在富 I 的生长环境下, $\mu_{\text{I}} = \mu_{\text{I(bulk)}}$, 由 (2) 和 (3) 式可得 $\mu_{\text{In}} = \mu_{\text{In(bulk)}} + \Delta H(\text{InI})$. 因此由 (1) 式可以分别计算出富 In 和富 I 两种情况下的缺陷形成能, 一般情况的形成能取值应该在这两者之间.

本文计算了富 In 和富 I 条件下 InI 六种本征缺陷的形成能. 缺陷形成能反映了缺陷在生长过程中形成的难易程度, 形成能越小缺陷越容易形成, 反之越难形成. 其计算结果如表 2 所示.

表 2 InI 晶体本征缺陷的形成能

	富 In/eV	富 I/eV
V_I	1.603	2.563
V_{In}	1.893	0.933
I_{In}	3.256	1.336
I_{InI}	1.480	3.400
I_i	2.545	1.584
In_i	0.793	1.753

从表 2 的结果可以看出, In_i 的形成能在两种情况下都很小, 很容易形成, 特别是在富 In 的生长环境下. V_{In} 的形成能总体也很低, 容易形成, 特别是在富 I 的生长环境下. 与 In_i 和 V_{In} 缺陷相比, I_i 和 V_I 都具有较大的形成能, 但是和其他两种反位缺陷相比, 还应认为较容易形成. In_I 和 I_{In} 两种反位缺陷总体具有较大的形成能, 不易形成, 只是在富 In 的情况下 In_I 可能形成, 在富 I 的情况下 I_{In} 可能形成.

文中计算的是电中性条件下本征缺陷的形成能. 缺陷的形成能会随带电量和费米能级的位置而变化, 相关情况有待进一步研究.

3.3 含有本征缺陷的 InI 晶体的电子结构

由于各种缺陷态的计算都采用了较大的超胞, 计算出的能带结构复杂而不利于分析, 因此本文从态密度的角度对缺陷能级进行分析. 理想和六种本征点缺陷下的 InI 总态密度如图 5 所示, 图中能量零点标定为费米能级位置. 各种缺陷下的分波态密度如图 6 所示. 与理想 InI 的总态密度相比, 如果缺陷导致费米能级向低能方向移动进入价带, 在价带顶 (VBM) 位置形成一部分占据能级, 价带内的电子可以跃迁到此能级上从而在价带内产生空穴, 此种缺陷为受主缺陷. 如果缺陷导致费米能级向高能导带方向移动, 在导带底 (CBM) 位置形成一部分占据能级, 则此种缺陷为施主缺陷^[24].

为了便于说明, 我们把缺陷态的能量中心定义为对应的缺陷能级, 即缺陷态填满电子时所具有的能量和这些电子全部集中在缺陷能级上具有相同的能量. 从 V_I 的总态密度可以看出, 形成的缺陷能级 a 位于 CBM 以下 0.2 eV 处, 对其总态密度积分

可得, 缺陷能级 a 能容纳两个电子且已被占满, 是一个类 s 态的能级, 且费米能级进入了导带, 所以 V_I 表现为施主缺陷. 由分态密度图 6(a) 可知该缺陷态主要由 V_I 空位相邻的 In 5p 态杂化形成.

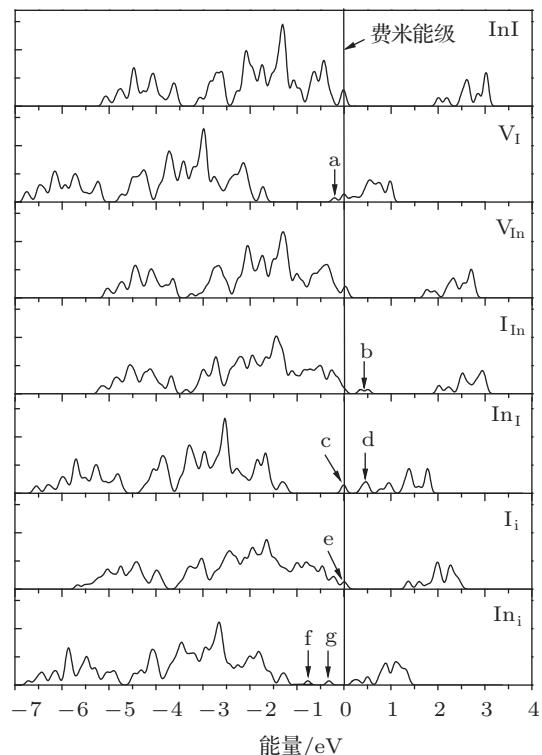


图 5 理想和本征缺陷下 InI 的总态密度图

V_{In} 空位缺陷并没有在禁带中引入缺陷能级, 但 In 原子的缺失使得费米能级附近价带的峰值由 28 eV 降到了 20 eV. 由于材料的电导率主要由费米能级附近的电子态决定, 所以 InI 的导电性会下降, 同时价带顶和导带底的电子态距离减少导致禁带宽度稍微变小.

I_{In} 在 VBM 以上 0.3 eV 处形成一个缺陷能级 b, 该能级能够容纳 4 个电子, 基态下没有电子占据, 费米能级向价带移动, 因此表现为受主缺陷, 由图 6(c) 可知, 该缺陷是由反位 I 和其周围 I 原子的 5p 态杂化形成.

In_I 的总态密度图中, 从价带到导带方向, 出现了一深一浅的峰值, 费米能级向导带方向移动, 对应的缺陷能级 c 和 d 分别位于 CBM 以下 0.7 eV 和 0.3 eV 处. 分别对总态密度积分可得 c 是一个可以容纳 2 个电子的类 s 态的能级, 基态下有 1 个电子占据, 形成距离导带顶较远的深缺陷能级, 俘获电子能力更强而表现为电子陷阱. 而 d 能级能够容纳 4 个电子, 四个位置全空, 由于靠近 CBM 而表现为

施主缺陷, 分析图 6(d) 得出二者都是由反位 In 和附近 In 原子的 5p 态杂化形成.

I_i 在 VBM 以上 0.2 eV 处形成了一个类 s 态的

缺陷能级 e , 该能级能容纳 2 个电子, 基态下有 1 个电子占据, 靠近 VBM 而表现为受主缺陷, 从图 6(e) 可知 I_i 由间隙 I 5p 态和其附近的 I 5p 态杂化形成.

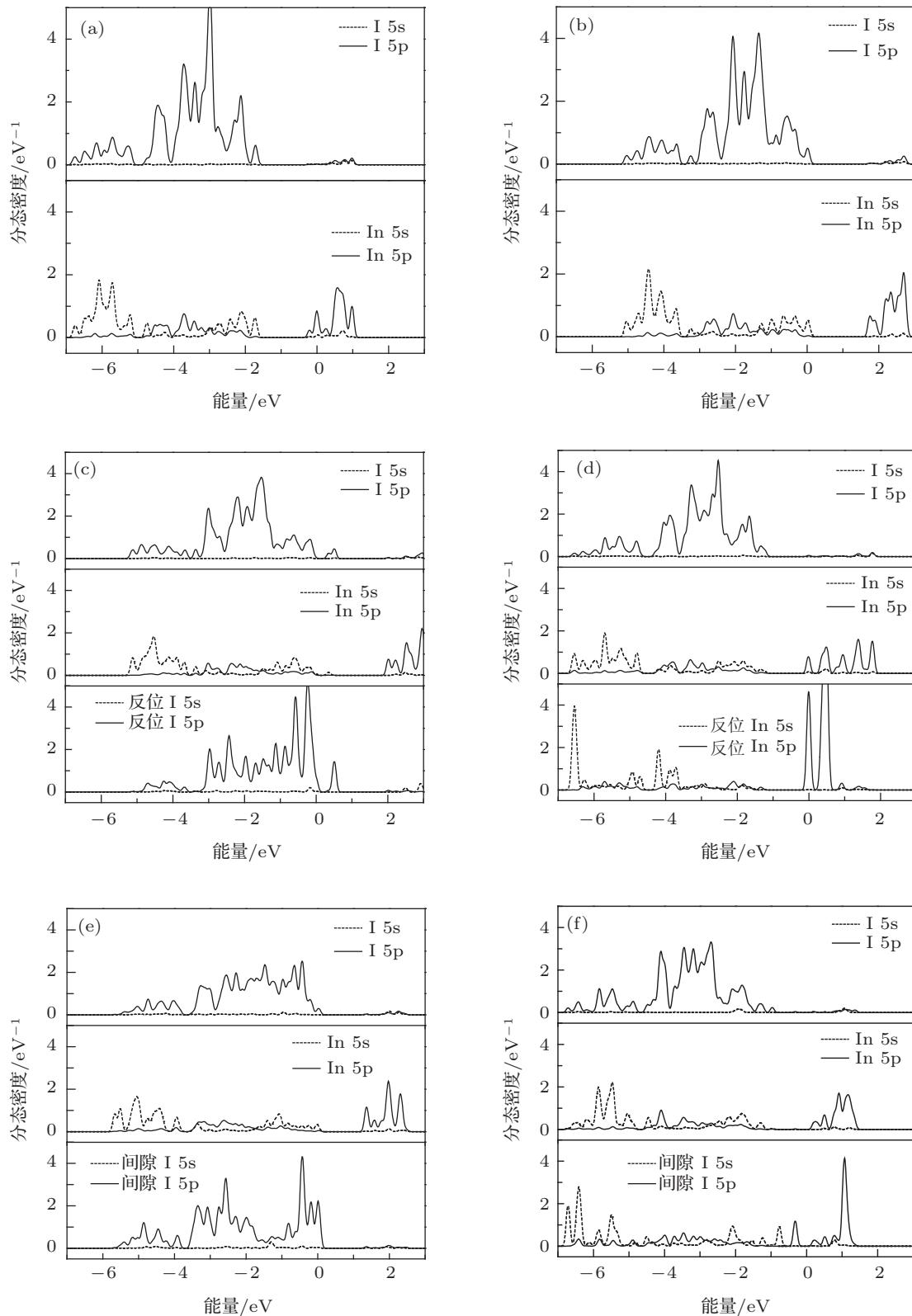


图 6 InI 6 种本征缺陷下的分波态密度图 (a) V_I ; (b) V_{In} ; (c) I_{In} ; (d) I_I ; (e) I_i ; (f) I_{Ini}

In_i 在 VBM 以上约 0.5 eV 和 CBM 以下约 1.0 eV 处分别形成了两个类 s 态缺陷能级 f 和 g, f 在基态情况下已被占满, 形成距离价带顶较远的一个深缺陷能级, 其俘获空穴能力更强而表现为空穴陷阱, 分析图 6(f) 可得 In_i 由间隙 In 5s 态和相邻的 I 5p 态杂化形成; 缺陷能级 g 位于禁带中心附近, 是一个深缺陷能级, 距离价带顶和导带底距离差不多, 对电子和空穴具有差不多大小的俘获概率而表现为复合中心, 基态下也被占满, 由间隙 In 5p 态电子决定。

为方便对比, 将上述的缺陷能级计算结果总结如图 7 所示 (实心圆点表示有电子占据, 空心圆点表示没有电子占据). 由缺陷形成能分析可知, In_i 和 V_{In} 形成能总体较低, 是主要的低能缺陷, 而 V_{In} 在禁带中并没有引入缺陷能级, 所以 In_i 会对 InI 载流子传输有最主要的影响. 从图 7 可以看出, In_i 形成的位于禁带中心附近的深缺陷能级的电离能较大, 一般不电离, 对材料载流子没有贡献, 但是可以作为复合中心, 促进非平衡载流子复合 (即电子-空穴成对消失), 电子和空穴存在的平均时间变短, 使少数载流子的寿命降低; 而 In_i 所形成的空穴陷阱会俘获价带的空穴, 空穴的寿命减小. 同时该陷阱电离为带电中心, 空穴在漂移过程中会受到此带电中心的散射, 导致空穴的平均漂移速度 V_d 降低. 由于载流子迁移率 $\mu = V_d/E$ (电场 E 恒定), 平均漂移速

度的降低使得空穴迁移率的值减小, 进而降低了空穴的 $\mu\tau$ 值, 该结果与 Biswas 和 Du^[25] 的报道一致.

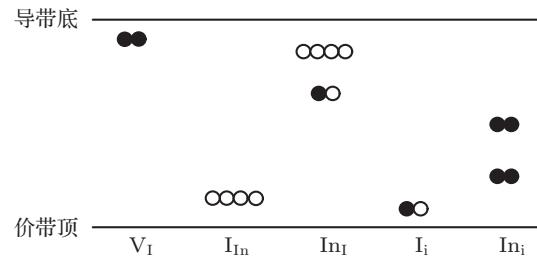


图 7 InI 本征缺陷所形成的缺陷能级示意图

4 结 论

用基于密度泛函理论的平面波赝势法对 InI 六种本征点缺陷进行了研究. 通过计算各种缺陷的形成能, 得知 In_i 和 V_{In} 的形成能总体较低, 较易形成, 尤其是 In_i , 而其他缺陷的形成能相对较高, 难以形成. 通过对本征点缺陷态密度的计算来确定各缺陷能级位置及其电子占据情况, 发现 In_i 会分别引入位于禁带中心附近的复合中心和空穴陷阱, 前者促进非平衡载流子复合, 降低少数载流子的寿命, 后者俘获空穴而降低空穴的 $\mu\tau$ 值, 影响载流子的传输. 因此, 在 InI 晶体的实际生长过程中, 如果能够有效控制 In_i 缺陷的形成, 那么就能提高 InI 晶体载流子的 $\mu\tau$ 值进而获得优异的核探测性能.

- [1] Runkle R C, Smith L E, Peurung A J 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 041101
- [2] Du M H, Singh D J 2010 *Phys. Rev. B* **82** 045203
- [3] Jin F, Itoh T, Goto T 1989 *J. Phys. Soc. Jpn.* **58** 2586
- [4] Jones R E, Templeton D H 1955 *Acta Crystallogr.* **8** 847
- [5] Zhang M G, Yan H Y, Zhang G T, Wei Q, Wang H 2011 *Physica B* **407** 398
- [6] Peretti E A 1956 *J. Am. Chem. Soc.* **78** 5745
- [7] Levy F, Mooser E 1972 *Helv. Phys. Acta* **3** 69
- [8] Ohno N, Fujita M, Nakai Y, Nakamura K 1978 *Solid State Commun.* **28** 137
- [9] Nakamura K, Nobuhito O, Masami F, Yoshio N 1979 *J. Lumin.* **18-19** 381
- [10] Shah K S, Moy L P, Zhang J, Misra M M, Moses W W 1992 *SPIE* **1734** 161
- [11] Kolinko M I 1994 *J. Phys.* **6** 183
- [12] Oondera T, Hitomi K, Shoji T 2006 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **50** 3055
- [13] Nicoara I, Dicoara N, Bertorello C, Slack G A, Ostrogorsky A G, Groza M, Burger A 2011 *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **1341** 95
- [14] Jie W Q 2010 *Principle and Technology of Crystal Growth* (Beijing: Science Press) p577 (in Chinese) [介万奇 2010 晶体生长原理与技术 (北京: 科学出版社) 第 577 页]
- [15] Zhukovskii Y F, Kotomin E A, Fuks D, Dorfman S 2004 *Surf. Sci.* **566** 122
- [16] Chahed A, Benhalal O, Laksari S, Abbar B, Bouhafs B, Aourag H 2005 *Physica B* **367** 142
- [17] Li G Q, Zhang X C, Ding G Y, Fan C M, Liang Z H, Han P D 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 127301 (in Chinese) [李国旗, 张小超, 丁光月, 樊彩梅, 梁振海, 韩培德 2013 物理学报 **62** 127301]
- [18] Ye H G, Chen G D, Zhu Y Z, Zhang J W 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5376 (in Chinese) [耶红刚, 陈光德, 竹有章, 张俊武 2007 物理学报 **56** 5376]
- [19] Bourgoin J C, von Bardeleben H J, Stie-venard D 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 65
- [20] Zhang M, Zhang C H, Shen J 2011 *Chin. Phys. B* **20** 017101
- [21] Wang A L, Wu Z M, Wang C, Hu A Y, Zhao R Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 137101 (in Chinese) [王爱玲, 吴志民, 王聪, 胡爱元, 赵若禹 2013 物理学报 **62** 137101]
- [22] van de Walle C G, Neugebauer J 2004 *J. Appl. Phys. Rev.* **95** 3851
- [23] Haynes W M 2011 *Handbook of Chemistry and Physics* (Boca Raton: CRC Press) pp5-14
- [24] Ding S F, Fan G H, Li S T, Xiao B 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4062 (in Chinese) [丁少锋, 范广涵, 李述体, 肖冰 2007 物理学报 **56** 4062]
- [25] Biswas K, Du M H 2011 *Appl. Phys.* **109** 113

First-principles study of the native defects in InI crystal*

Zhang Wei¹⁾ Xu Zhao-Peng¹⁾ Wang Hai-Yan^{2)†} Chen Fei-Hong¹⁾ He Chang³⁾

1) (Key Laboratory for Special Fiber and Fiber Sensor of Hebei Province, College of Information Science and Engineering, Yanshan University,

Qinhuangdao 066004, China)

2) (Key Laboratory of Applied Chemistry of Hebei Province, College of Environmental Science and Engineering, Yanshan University,

Qinhuangdao 066004, China)

3) (Parks College of Engineering, Aviation and Technology, Electrical and Computer Engineering Department, Saint Louis University,

Saint Louis 63103, U.S.A.)

(Received 30 July 2013; revised manuscript received 16 September 2013)

Abstract

The structures of six possible native point defects (I and In vacancies, I and In antisites, I and In interstitials) that maybe exist in the orthorhombic indium iodide (InI) crystal are optimized and investigated by the first-principles calculations based on density functional theory. The levels of difficulty in forming defects in their growth processes are obtained by calculating the defect energy levels; the position of each kind of energy level of native point defect and its effect on carrier transport are analyzed via calculating the density of states. The results show that the dominant low-energy defect of In interstitial induces a recombination center and a deep hole trap: the former shortens the lifetime of the minority carriers and the latter captures the holes from the valence band, thereby reducing the mobility-lifetime product of the hole. The calculation results provide a theoretical guidance for improving the mobility-lifetime product of carriers in InI crystal and also are helpful in obtaining the excellent materials for detecting the nuclear radiation of InI crystal.

Keywords: InI, formation energy, defect energy levels, deep hole trap

PACS: 31.15.es, 71.15.Mb, 71.20.Nr, 71.15.Nc

DOI: 10.7498/aps.62.243101

* Project supported by the Key Basic Research Project of the Applied Basic Research Programs of Hebei Province, China (Grant No. 13961103D) and the Innovation Project of the 46th Research Institute of China Electronics Technology Group Corporation, China (Grant No. CJ20120208).

† Corresponding author. E-mail: hywang@ysu.edu.cn