

In-2N高共掺位向对ZnO(GGA+U)导电性能影响的研究*

侯清玉¹⁾† 乌云²⁾ 赵春旺¹⁾

1)(内蒙古工业大学理学院物理系, 呼和浩特 010051)

2)(内蒙古化工职业学院化学工程系, 呼和浩特 010071)

(2013年10月11日收到; 2014年3月24日收到修改稿)

目前, 虽然In和2N共掺对ZnO导电性能影响的实验研究均有报道, 但是, In和2N共掺在ZnO中均是随机掺杂, 没有考虑利用ZnO的单极性结构进行择优位向共掺。第一性原理的出现能够解决该问题。因此, 本文采用密度泛函理论框架下的第一性原理平面波超软赝势方法, 计算了未掺杂ZnO单胞、不同位向高共掺In-2N原子的Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y ($x = 0.0625$, $y = 0.125$)两种超胞模型的能带结构分布、态密度分布和吸收光谱分布。计算结果表明, 高共掺In-N原子沿c轴取向成键的条件下, 掺杂浓度越低, 体系更稳定、带隙越窄、有效质量越小、迁移率越增加、相对自由空穴浓度越增加、电导率越增加、导电性能越理想。计算结果与实验结果相一致。这对设计和制备导电功能材料有一定的理论指导作用。

关键词: In-2N高掺杂ZnO, 导电性能, 第一性原理

PACS: 72.10.-d, 72.15.-v, 73.20.At

DOI: 10.7498/aps.63.137201

1 引言

ZnO是直接宽带隙氧化物半导体材料, 激子结合能为60 meV, 室温下带隙宽约为3.37 eV^[1]。与氮化镓(GaN)的带隙宽相近。ZnO在光电、压电、热电、铁电等方面都具有优异的性能, 已受到研究者的广泛关注^[2-5]。

迄今为止, 在实验上共掺In-N对ZnO的导电性能影响的研究比较广泛, Bian等^[6]研究了采用超声波高温分解沉淀法对未掺杂和共掺In-N的ZnO导电性能的影响, 结果表明, 与未掺杂ZnO的导电性能相比, 共掺In-N的ZnO的p型电导率明显提高。Chen等^[7]研究了采用直流反应磁控溅射法对共掺In-N的ZnO导电性能的影响, 结果表明, 在Si衬底上溅射, p型掺杂体系ZnO的导电性能最理想。Yuan等^[8]研究了离子束增强沉积物的

方法对共掺In-N的ZnO结构和光电性能的影响, 结果表明, 当退火温度达到500 °C时, p型掺杂体系ZnO的电阻率最小。Chen等^[9]研究了采用直流反应磁控溅射法对共掺In-N的ZnO导电性能的影响, 结果表明, 在玻璃衬底上溅射, 当调节温度达到540 °C时, p型掺杂体系ZnO的电阻率最小。Zhao等^[10]采用超声波均匀沉淀法, 研究了在Si基板上沉淀对In-N高共掺ZnO p型导电性能的影响, 结果表明, 当Zn:N:In掺杂比例为1:3:0.05时, 高掺杂体系仍表现为p型半导体。

在理论计算上共掺In-N对ZnO影响的第一性原理研究也比较广泛, 陈琨等^[11]采用第一性原理研究了In-N共掺ZnO的计算, 结果表明, N掺杂ZnO在能隙中引入了深受主能级, 载流子(空穴)局域于价带顶附近, 而加入激活施主In的In-N共掺杂ZnO, 受主能级向低能方向移动, 形成了浅受主能级。同时, 受主能级带变宽、非局域

* 国家自然科学基金(批准号: 61366008, 51261017)、教育部“春晖计划”资助项目和内蒙古自治区高等学校科学研究项目(批准号: NJZZ13099)资助的课题。

† 通讯作者。E-mail: by0501119@126.com

化特征明显、提高了掺杂浓度和系统的稳定性。Yamamoto等^[12]采用第一性原理研究了将活性施主和受主共掺入ZnO，实现了ZnO的p型导电，结果表明，ZnO中施主元素(如Al, Ga, In)的掺入会降低Madelung能量，而受主元素(如N)的掺入导致Madelung能量升高，而当施主与受主共同掺入ZnO中，体系的Madelung能量也会降低。Li等^[13]采用第一性原理研究了(Al, Ga, In)和N共掺对ZnO有效空穴质量和电离率的影响，结果表明，在(Al, Ga, In)和N共掺中，In-N共掺对ZnO的空穴迁移率和电离率效果最理想。虽然文献[12, 13]采用第一性原理研究了(Al, Ga, In)和N共掺对ZnO导电性能的影响。但是，(Al, Ga, In)和N共掺在ZnO中均是随机掺杂，没有考虑ZnO的非对称性。由于ZnO有非对称性，即单极性结构，共掺杂元素的位置和施主和受主杂质局域成键方向(择优位向)对掺杂体系的电子结构有很大的影响。因此，本研究采用基于密度泛函理论框架下的第一性原理平面波超软赝势方法，利用ZnO的非对称性，即单极性，分别研究相同浓度择优位向In-2N共掺对ZnO导电性能的影响。研究发现，In-2N沿c轴取向成键比垂直于c轴取向成键更有利于掺杂体系导电性能的提高。这对设计和制备导电功能材料有一定的理论指导作用。

2 理论模型和计算方法

2.1 理论模型

未掺杂ZnO单胞是六方纤锌矿结构，属于 $P63mc$ 空间群，对称性为 $C6v\cdot4$ 。计算采用In-N成键共掺沿c轴方向或垂直于c轴方向两种成键方式 $(2\times2\times2)Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y$ ($x = 0.0625$, $y = 0.125$) 两种超胞模型，模型如图1(a)和(b)所示。其中，一个In原子替换一个Zn原子，2N原子替换2O原子，In摩尔分数为0.0625，N的摩尔分数为0.125，即，掺杂比例为In : N = 1 : 2。图1(a)为In-N掺杂沿c轴取向成键，另一个N则位于与含有In-N对的层相邻一层中的次近邻位置；图1(b)为In-N原子沿垂直于c轴取向成键，另一个N则位于与含有In-N对的层相邻一层中的次近邻位置。图1(a)和(b)虽然掺杂浓度相同，但是，由于ZnO的非对称性，经研究后发现，两种掺杂体系位向不同，研究后发现导电性能不同。为了简化说明方便，后面区别图1(a)和(b)两种共掺模型时只提In-N成键方向，

另一个N掺杂占位则忽略说明。

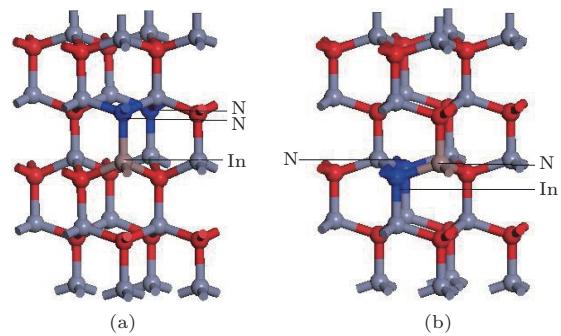


图1 模型(a) In-N沿c轴方向成键, 模型(b) In-N垂直c轴方向成键模型

2.2 计算方法

本文采用密度泛函理论框架下的广义梯度近似(GGA)平面波赝势方法^[13]，用交换相关能PBE泛函描述。所选赝势为超软赝势。用于构建赝势的电子组态分别为 $Zn3d^{10}4s^2$, $In4d^{10}5s^25p^1$, $O2s^22p^4$, $N2s^22p^3$ 。计算的收敛精度皆设为 1.0×10^{-5} eV/atom，作用在每个原子上的力不大于0.5 eV/nm，内应力不大于0.05 GPa，公差偏移为0.0001 nm。布里渊区k点的选取 $(2\times2\times2)$ 超胞为 $4\times4\times2$ ，能量截断半径为340 eV。计算采用电子自旋极化处理，本文采用+U的新方法修正带隙，经尝试后发现，Zn的3d态U值取5.5 eV，O的2p态U值取8 eV，In的5p态U值取4 eV，N的2p态U值取4 eV，掺杂前后体系的带隙计算结果与实验结果^[14]相符合。对所有模型进行几何结构优化的基础上，然后计算态密度分布和能带结构分布，有机结合OriginPro 7.5软件，从态密度分布中计算相对自由空穴浓度；从能带结构分布中计算空穴有效质量。根据空穴迁移率和空穴电导率公式计算类比，最后确认不同掺杂方式对掺杂体系导电性能的优劣。

3 计算结果与讨论

3.1 几何结构优化分析

几何结构优化的折合晶胞参数和总能量见表1，从表1中看出，未掺杂ZnO单胞的晶格常数与实验结果^[14]相符合，说明本文选取的参数设置是合理的。计算中 In^{3+} 和 N^{3-} 离子分别取代 Zn^{2+} 和 O^{2-} 离子，掺入后的晶胞体积变大。根据量子化学理论知道，因为 N^{3-} 离子的半径0.146 nm较

O^{2-} 离子半径 0.140 nm 大; In^{3+} 离子半径 0.080 nm 较 Zn^{2+} 离子的半径 0.074 nm 大, 使其总能量越升高, 稳定性越下降。计算结果与实验结果^[14]相符合。从表 1 中看出, 两种不同位向掺杂体系结构

和总能量变化不是很大, 但是两种体系的态密度分布和能带结构分布有很大的变化, 那么, 根据态密度分布和能带结构分布研究体系的导电性能肯定不同。这在后面具体研究中能获得验证。

表 1 $Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y$ ($x = 0.0625$, $y = 0.125$) 结构优化后的折合晶胞参数和总能量

类型	$a, b, c/\text{nm}$		V/nm^3	E/eV
	本文工作	文献		
ZnO	$a = 0.3298$, $c = 0.5318$	$a = 0.3250$ ^[14] , $c = 0.5205$ ^[14]	0.0500	-4311
$Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y^a$	$a = 0.3313$, $c = 0.5366$	$a = 0.3255$ ^[14] , $c = 0.5210$ ^[14]	0.0507	-4234
$Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y^b$	$a = 0.3319$, $c = 0.5367$	$a = 0.3255$ ^[14] , $c = 0.5210$ ^[14]	0.0508	-4233

a) 表示 In-N 共掺沿 c 轴方向成键体系, b) 表示 In-N 共掺垂直于 c 轴方向成键体系。

3.2 高掺杂电离杂质浓度分析

根据文献[15]报道知道, ZnO 半导体莫特(Mott)相变(掺杂体系半金属化, 即高掺杂简并化)的临界浓度由下式来判断:

$$a_H n_c^{1/3} = 0.2, \quad (1)$$

其中, a_H 是波尔半径 2.03 nm^[21], n_c 是莫特(Mott)相变掺杂浓度。把已知数据代入(1)式中, 结果得出临界浓度 $n_c = 9.56 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 。本文计算的两种不同位向超胞的体浓度分别约为 $7.41 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, $7.39 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ 。结果表明, 杂质浓度均是高掺杂的 p 型半导体。计算结果与实验结果^[16]相符合。这在研究态密度分布和能带结构分布中进一步获得验证。

3.3 相对空穴浓度分析

计算得出未掺杂 ZnO 单胞、沿 c 轴方向成键 In-2N 共掺 $Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y$ ($x = 0.0625$, $y = 0.125$) 超胞以及垂直于 c 轴方向成键 In-2N 共掺 $Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y$ ($x = 0.0625$, $y = 0.125$) 超胞的总态密度分布如图 2(a), (b), (c) 所示, 在图中能量零点为费米能级, 以下类同。VB 表示价带, CB 表示导带。

从图 2(a) 中看出, 未掺杂 ZnO 单胞的费米能级在价带顶附近, 按一般的定义, 费米能级在带隙的中部附近, 而 CASTEP 软件定义的费米能级在价带顶部, 即图中零点为费米能级^[18]。

根据图 2(b), (c) 看出, 相同浓度不同位向 In-2N 共掺 ZnO 超胞的费米能级进入价带的深浅程度不同, 两种价带中的相对空穴浓度不同。根据图 2(b), (c) 价带内占据自由空穴的部分用作图

OriginPro 7.5 软件积分运算, 得到空穴进入价带的相对空穴浓度。设图 2(b), (c) 价带内相对空穴浓度

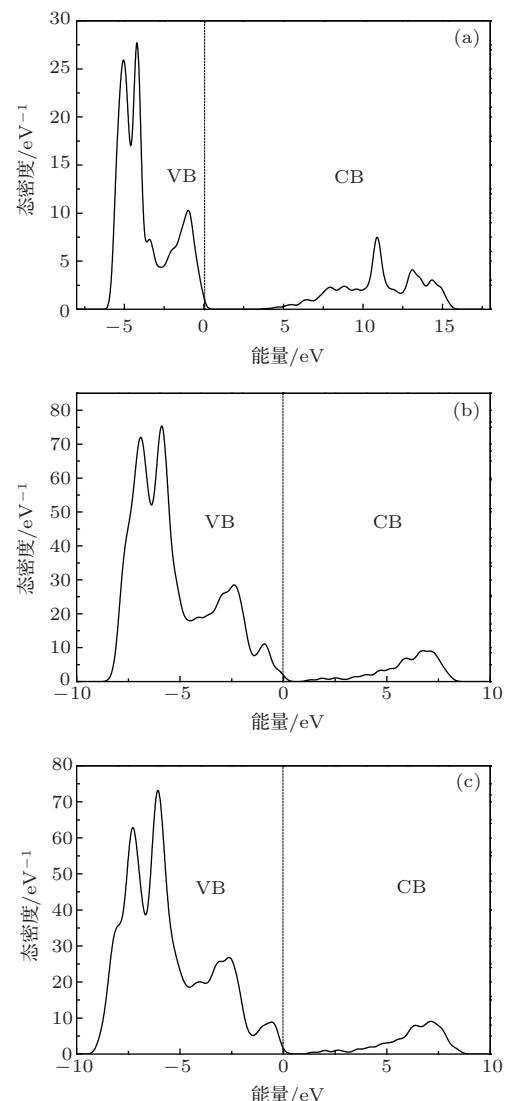


图 2 总态密度分布 (a) 未掺杂 ZnO ; (b) In-N 共掺沿 c 轴方向成键体系; (c) In-N 共掺垂直于 c 轴方向成键体系

分别为 p_1, p_2 . 计算结果分别约为 $6.74 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $4.27 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. 结果表明, 沿 c 轴方向成键 In-2N 共掺的体系中的相对空穴浓度大于垂直于 c 轴方向成键 In-2N 共掺体系中的相对空穴浓度, 即 $p_1 > p_2$.

3.4 有效质量分析

计算得出未掺杂 ZnO 单胞、相同浓度不同位向 In-2N 共掺 ZnO 超胞的能带结构分布如图 3(a), (b), (c) 所示.

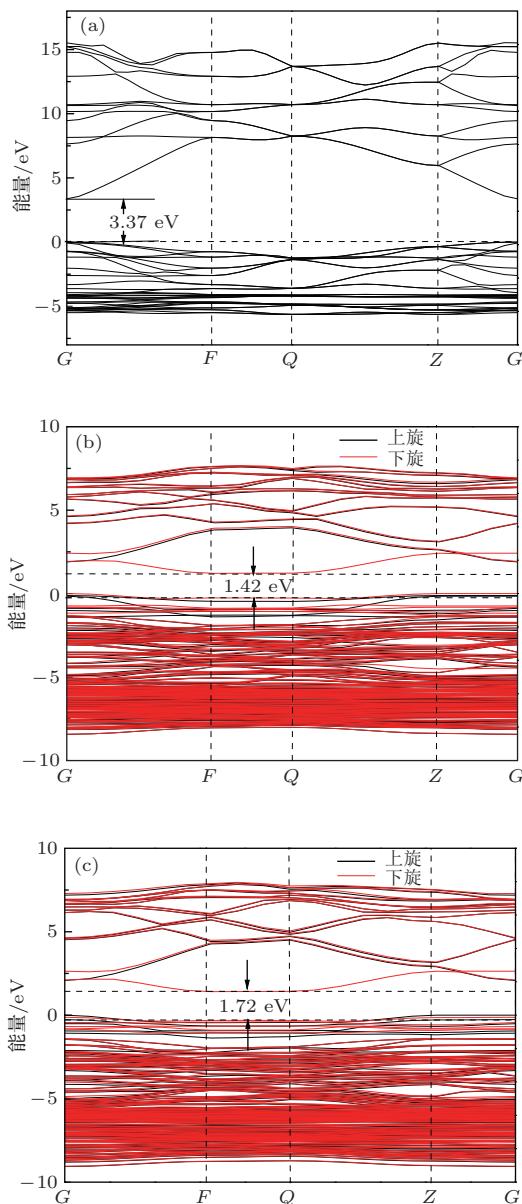


图 3 能带结构分布 (a) 未掺杂 ZnO; (b) In-N 沿 c 轴方向成键体系; (c) In-N 垂直 c 轴方向成键体系

由图 3(a) 看出, 未掺杂 ZnO 单胞的价带由 Zn3d 和 O2p 两部分组成, 价带顶主要是 O2p 态组成, 导带部分主要是 Zn4s 态组成. 此计算结果与文

献 [19] 的计算结果相一致, 这里不再赘述. $+U$ 值修正后, 未掺杂 ZnO 单胞的最小带隙约为 $E_g = 3.37$ eV. 计算结果与实验结果 [14] 相符合.

$+U$ 值修正后, 由图 3(b), (c) 看出, 最小带隙宽度分别约为 1.42 eV 和 1.72 eV. 计算结果与实验结果 [14] 相符合. 计算结果表明, 在相同掺杂浓度的条件下, 沿 c 轴方向成键 In-2N 共掺 $\text{Zn}_{1-x}\text{In}_x\text{O}_{1-y}\text{N}_y$ ($x = 0.0625, y = 0.125$) 超胞比垂直于 c 轴方向成键 In-2N 共掺 $\text{Zn}_{1-x}\text{In}_x\text{O}_{1-y}\text{N}_y$ ($x = 0.0625, y = 0.125$) 超胞的最小带隙窄. 那么, 前者的空穴有效质量小于后者, 这是由于带隙宽度与空穴有效质量成正比 [20].

为了定量说明空穴有效质量的大小关系, 由图 3(b) 和 (c) 分别单独输出价带最顶部的那一条能级, 用作图软件 OriginPro 7.5 沿 G 方向求该曲线的二阶导数, 把已知数据和普朗克常数代入空穴有效质量公式 $m_h^* = \frac{\hbar^2}{4\pi^2} \left(\frac{d^2E}{dk^2} \right)^{-1}$ 中, 那么, 沿 c 轴方向成键 In-2N 共掺 $\text{Zn}_{1-x}\text{In}_x\text{O}_{1-y}\text{N}_y$ ($x = 0.0625, y = 0.125$) 超胞的空穴有效质量 m_{h1}^* 约为 $5.09 \times 10^{-31} \text{ kg}$; 垂直于 c 轴方向成键 In-2N 共掺 $\text{Zn}_{1-x}\text{In}_x\text{O}_{1-y}\text{N}_y$ ($x = 0.0625, y = 0.125$) 超胞的空穴有效质量 m_{h2}^* 约为 $5.35 \times 10^{-31} \text{ kg}$. 结果表明, 沿 c 轴方向成键 In-2N 共掺 $\text{Zn}_{1-x}\text{In}_x\text{O}_{1-y}\text{N}_y$ ($x = 0.0625, y = 0.125$) 超胞的空穴有效质量小于垂直于 c 轴方向成键 In-2N 共掺 $\text{Zn}_{1-x}\text{In}_x\text{O}_{1-y}\text{N}_y$ ($x = 0.0625, y = 0.125$) 超胞的空穴有效质量, 即 $m_{h1}^* < m_{h2}^*$. 这与上述定性分析结果相符合.

3.5 迁移率分析

由于第一性原理研究半导体的散射, 以电离杂质散射为主, 那么, 电离杂质散射的影响与掺杂浓度有关. 由于掺杂浓度相同, 空穴和电离杂质相遇而被散射的机会相同. 设电离掺杂浓度为 N_i , 电离杂质对载流子的散射概率为 P_i , 温度为 T , 三者的关系为

$$P_i \propto N_i T^{-3/2}, \quad (2)$$

由于平均自由时间 τ 和散射概率成反比关系, 则

$$\tau_i \propto N_i^{-1} T^{3/2}, \quad (3)$$

根据空穴迁移率公式为

$$\mu_i = \frac{q\tau_i}{m_h^*}. \quad (4)$$

显然,掺杂浓度和温度相同的条件下,空穴迁移率与空穴有效质量成反比。由于沿c轴方向成键In-2N共掺Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y(x=0.0625,y=0.125)超胞的空穴有效质量小于垂直于c轴方向成键In-2N共掺Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y(x=0.0625,y=0.125)超胞的空穴有效质量。因此,由于m_{h1}^{*}< m_{h2}^{*},所以,根据(4)式可知,空穴迁移率前者大于后者。

3.6 电导率分析

根据半导体物理学知道,空穴电导率公式为

$$\sigma_i = \frac{p_i q^2 \tau_i}{m_h^*} \quad (5)$$

其中,p_i是进入价带的相对空穴浓度,q是空穴的电量,m_h^{*}是空穴的有效质量。令沿c轴方向成键In-2N共掺Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y(x=0.0625,y=0.125)超胞的空穴电导率为σ₁,垂直于c轴方向成键In-2N共掺Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y(x=0.0625,y=0.125)超胞的空穴电导率为σ₂。那么

$$\frac{\sigma_1}{\sigma_2} = \frac{\frac{p_1 q^2 \tau_1}{m_{h1}^*}}{\frac{p_2 q^2 \tau_2}{m_{h2}^*}}, \quad (6)$$

其中,由于掺杂浓度相同,所以散射概率相同,τ₁=τ₂。把上面已知数据代入(6)式中得:
 $\frac{\sigma_1}{\sigma_2} = \frac{6.74 \times 10^{20} \times 5.35 \times 10^{-30}}{4.27 \times 10^{20} \times 5.09 \times 10^{-30}} \approx 1.66$ 。由此可知,σ₁>σ₂。这表明沿c轴方向成键In-2N共掺Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y(x=0.0625,y=0.125)超胞的空穴电导率大于垂直于c轴方向成键In-2N共掺Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y(x=0.0625,y=0.125)超胞的空穴电导率。

3.7 电离能和Bohr半径分析

由于相同浓度不同位向共掺的Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y(x=0.0625,y=0.125)体系中,沿c轴方向成键In-2N共掺体系的电导率大于垂直于c轴方向成键In-N共掺体系的电导率。不妨从电离能和Bohr半径分析同样获得验证。根据文献[20]可知电子电离能和Bohr半径的表达式为

$$E_i = \frac{m_h^* E_o}{m_o \varepsilon_r^2}, \quad (7)$$

$$a = \frac{\varepsilon_r m_o a_o}{m_h^*}, \quad (8)$$

其中,m_o是自由电子的质量,E_o是类氢原子基态电子的电离能13.6 eV,ε_r是ZnO的相对介电常数

为8.66^[16,22]。从(7)和(8)式看出,由于其他参数是常数,电离能与空穴有效质量成正比,Bohr半径与空穴有效质量成反比。空穴有效质量越小,电离能越小,Bohr半径越大,形成ZnO的p型导电越容易。根据(7)和(8)以及有机结合m_{h1}^{*}<m_{h2}^{*}可知,沿c轴方向成键In-2N共掺体系电离能小于垂直于沿c轴方向In-N成键体系的电离能,Bohr半径恰好相反。说明沿c轴方向成键In-2N共掺体系受主的能级带非常宽,电子局域在非常宽的范围内很容易跃迁到导带。这从能带结构分布图3(b)和(c)相比较可以发现,图3(b)价带相对较宽,同样表明,沿c轴方向In-N成键的共掺体系更有利获得ZnO的p型导电。

4 结 论

采用第一性原理平面波超软赝势方法,+U值分别计算未掺杂、沿c轴方向成键和垂直于c轴方向成键In-2N共掺Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y(x=0.0625,y=0.125)两种超胞的能带结构分布和态密度分布,结果得出如下结论:

1. 沿c轴方向成键In-2N共掺体系稳定性略强于垂直于c轴方向成键In-N共掺体系的稳定性。
2. 沿c轴方向成键In-2N共掺体系相对空穴浓度大于垂直于c轴方向成键In-2N共掺体系的相对空穴浓度。
3. 沿c轴方向成键In-2N共掺体系空穴有效质量小于垂直于c轴方向成键In-2N共掺体系的空穴有效质量。
4. 沿c轴方向成键In-2N共掺体系空穴迁移率大于垂直于c轴方向成键In-2N共掺体系的空穴迁移率。
5. 沿c轴方向成键In-2N共掺体系空穴电导率大于垂直于c轴方向成键In-2N共掺体系的空穴电导率。
6. 沿c轴方向成键In-2N共掺体系电离能小于垂直于沿c轴方向In-N成键体系的电离能,Bohr半径恰好相反。沿c轴方向In-N成键的共掺体系更有利获得ZnO的p型导电。这对设计和制备新型掺杂ZnO半导体导电性能功能材料有一定的理论指导作用。

参考文献

- [1] Bae S Y, Na C W, Kang J H, Park J *2005 J Phys. Chem. B* **109** 2526

- [2] Badeker K 1907 *Ann. Phys. (LeiPzig)* **22** 749
- [3] GLima D, Kim D H, Kim J K, Kwon O, Yang K J, Park K I, Kim B S, Park S M W, Kwak D J 2006 *SuPerlattice Microst* **39** 107
- [4] Hao X T, Ma J, Zhang D H, Yang Y G, Ma H L, Cheng C F, Liu X D 2002 *Mat. Sci. Eng. B* **90** 50
- [5] Hao X T, Tan L W, Ong K S, Zhu F R 2006 *J. Cryst. Growth* **287** 44
- [6] Bian J M, Li X M, Chen L D, Yao Q 2004 *Chem. Phys. Lett.* **393** 256
- [7] Chen L L, Lu J G, Ye Z Z, Lin Y M, Zhao B H, Ye Y M, Li J S, Zhu L P 2005 *App. Phys. Lett.* **87** 252106
- [8] Yuan N Y, Fan L N, Li J H, Wang X Q 2007 *App. Surf. Sci.* **253** 4990
- [9] Chen L L, Ye Z Z, Lu J G, Chu P K 2006 *App. Phys. Lett.* **89** 252113
- [10] Zhao J L, Li X M, Krtschil A, Krost A, Yu W D, Zhang Y W, Gu Y F, Gao X D 2007 *App. Phys. Lett.* **90** 062118
- [11] Chen K, Fan G H, Zhang Y, Ding S F 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3138 (in Chinese) [陈琨, 范广涵, 章勇, 丁少峰 2008 物理学报 **57** 3138]
- [12] Yamamoto T, Yoshida H K 1999 *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** L166
- [13] Li P, Deng S H, Zhang L, Yu J Y, Liu G H 2010 *Chin. Phys. B* **19** 117102
- [14] Mapa M, Sivarajanji K, Bhange D S, Saha B, Chakraborty P, Viswanath A K, Gopinath C S 2010 *Chem. Mater.* **22** 565
- [15] Roth A P, Webb J B, Williams D F 1981 *Solid State Commun.* **39** 1269
- [16] Erhart P, Albe K, Klein A 2006 *Phys. Rev. B* **73** 205203
- [17] Zhao J L, Li X M, Krtschil A, Krost A, Yu W D, Zhang Y W, Gu Y F, Gao X D 2007 *App. Phys. Lett.* **90** 062118
- [18] Zhao H F, Cao Q X, Li J T 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5828 (in Chinese) [赵慧芳, 曹全喜, 李建涛 2008 物理学报 **57** 5828]
- [19] Erhart P, Albe K, Klein A 2006 *Phys. Rev. B* **73** 205203
- [20] Zhang J K, Deng S H, Jin H, Liu R L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5371 (in Chinese) [张金奎, 邓胜华, 金慧, 刘悦林. 2007 物理学报 **56** 5371]
- [21] Schleife A, Fuchs F, Furthmüller J 2006 *J. Phys. Rev. B* **73** 245212
- [22] Zhou C, Kang J 2004 *13th Proceedings of the International Conference on Semiconducting and Insulating Materials*, Beijing China, September 20-25, 2004 pp81-84

Study on the effect of In-N co-doping at preferential locality on the photoelectric function of ZnO (GGA+U)*

Hou Qing-Yu^{1)†} Wu Yun²⁾ Zhao Chun-Wang¹⁾

1) (College of Sciences, Inner Mongolia University of Technology, Hohhot 010051, China)

2) (Chemistry department, Inner Mongolia Vocational College of chemistry Engineering, Hohhot 010071, China)

(Received 11 October 2013; revised manuscript received 24 March 2014)

Abstract

Nowadays although the study of In-N co-doping effect on the photoelectric function of ZnO is relatively common, all of the In-N co-doped ZnO are of random doping, and the preferential locality doping using the unpolarized structure of ZnO has not been considered so far. Therefore, in this paper, based on the density functional theory using first-principles plane-wave ultrasoft pseudopotential method, the un-doped and the In-N heavily co-doped $Zn_{1-x}In_xO_{1-y}N_y$ ($x = 0.0625$, $y = 0.125$) in different orientations have been set up, and band structures and density of states have been calculated respectively. The calculated results show that the In-N atoms along the *c*-axis orientation has the advantages of high stability over those in the vertical *c*-axis direction, the band gap is narrower, the effective mass is smaller, the mobility is greater, and the hole concentration is higher, so that the conductivity of ZnO is higher in the In-N heavily co-doped materials. We believe that these results may be helpful to the design and preparation of the conductivity of In-N heavily co-doped ZnO.

Keywords: In-N high codoped ZnO, conductivity, first-principles

PACS: 72.10.-d, 72.15.-v, 73.20.At

DOI: 10.7498/aps.63.137201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61366008, 51261017), the Ministry of Education “Spring Sunshine” Plan Funding, and the College Science Research Project of Inner Mongolia Autonomous Region, China (Grant No. NJZZ13099).

† Corresponding author. E-mail: by0501119@126.com