

Ge掺杂对InI导电性能影响的第一性原理研究

王永贞 徐朝鹏 张文秀 张欣 王倩 张磊

First-principles study on the effect of Ge-doping on the conductivity of InI

Wang Yong-Zhen Xu Zhao-Peng Zhang Wen-Xiu Zhang Xin Wang Qian Zhang Lei

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica 63, 237101 (2014) DOI: 10.7498/aps.63.237101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.237101>

当期内容 View Table of Contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/volumn/home.shtml>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

金属Fe与间隙H原子相互作用的密度泛函研究

张凤春, 李春福, 文平, 罗强, 冉曾令

2014, 63(22): 227101. 全文: [PDF](#) (4191KB)

应力对硅烯上锂吸附的影响

李细莲, 刘刚, 杜桃园, 赵晶, 吴木生, 欧阳楚英, 徐波

2014, 63(21): 217101. 全文: [PDF](#) (736KB)

Ti掺杂W18O49纳米线的电子结构与NO<sub>2</sub>敏感性能的第一性原理研究

秦玉香, 刘梅, 化得燕

2014, 63(20): 207101. 全文: [PDF](#) (3021KB)

V高掺杂量对ZnO(GGA+U)导电性能和吸收光谱影响的研究

侯清玉, 吕致远, 赵春旺

2014, 63(19): 197102. 全文: [PDF](#) (386KB)

Cr,Mo,Ni在 $\alpha$ -Fe(C)中占位、键合性质及合金化效应的第一性原理研究

文平, 李春福, 赵毅, 张凤春, 童丽华

2014, 63(19): 197101. 全文: [PDF](#) (1512KB)

## Ge掺杂对InI导电性能影响的第一性原理研究\*

王永贞 徐朝鹏<sup>†</sup> 张文秀 张欣 王倩 张磊

(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)

(2014年7月9日收到; 2014年7月23日收到修改稿)

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, 在相同环境条件下对不同浓度 Ge 掺杂的 InI 导电性能进行了研究. 建立了由不同浓度的 Ge 原子替代 In 原子的  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  ( $x = 0, 0.125, 0.25$ ) 模型. 对低温下高掺杂 Ge 原子的  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  半导体的优化参数、总态密度、能带结构进行了计算. 结果表明: Ge 的掺入使  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  材料的体积减小, 总能量升高, 稳定性降低; Ge 原子浓度越大, 进入导带的相对电子数量越多,  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  电子迁移率减小, 电阻率增大, 同时最小光学带隙也增大, 有利于改善体系的核探测性能.

关键词: Ge 高掺杂 InI, 电阻率, 第一性原理

PACS: 71.15.-m, 71.15.Mb, 72.15.-v

DOI: 10.7498/aps.63.237101

## 1 引言

碘化铟 (InI) 是一种新型宽带隙 (2.0 eV)<sup>[1]</sup> 半导体材料, 在常温常压下是层状结构的底心正交晶体, 是典型的直接宽禁带半导体材料<sup>[2]</sup>. 碘化铟作为一种制作室温核辐射探测器的新材料, 具有高原子序数以及高密度、较高的电阻率、较大的载流子迁移率-寿命积等优点. 此外, 碘化铟晶体还具有在室温下易于使用和保存的特点, 碘化铟的熔点低 (365 °C), 在熔点和室温间不存在固-固相变, 因此, 用简单的熔体方法就可以获得高质量的碘化铟晶体, 这些优点使得碘化铟晶体成为制作室温核辐射探测器的热点材料之一.

迄今为止, 为改善碘化铟晶体的核探测性能, 实验方面的研究主要集中在改进晶体的生长工艺、提纯和合成技术等方面<sup>[3-5]</sup>. 2012年, 美国布鲁海文国家重点实验室的 Hossain 等<sup>[6]</sup> 生长出了电阻率为  $10^{11} \Omega\cdot\text{cm}$  的碘化铟晶体, 并获得了优异的核探测性能. 理论研究方面, 2013年张伟等<sup>[7]</sup> 利用第

一性原理研究了碘化铟本征缺陷对载流子传输特性的影响; 2014年徐朝鹏等<sup>[8]</sup> 分析了 Tl 掺杂使 InI 禁带宽度增大的机理及吸收光谱蓝移的原因. 影响半导体材料核辐射探测性能的参数主要有禁带宽度、电阻率、载流子迁移率-寿命积等, 其中较大的禁带宽度和较高的电阻率能够保证探测器在室温工作时较低的漏电流. 因此, 可以考虑如何增大半导体的禁带宽度和电阻率以提高其核探测性能. 目前实验和理论上都没有研究过掺杂对碘化铟导电性能的影响, 也没有利用掺杂提高电阻率进而改善碘化铟核探测性能的研究. 而掺杂改性在其他半导体材料中的应用较为广泛, 如实验上已证明掺钴氟化镁 ( $\text{Co:MgF}_2$ ) 制成的激光器是目前调谐范围最宽的固体可调谐激光器<sup>[9]</sup>; 李学良和陈洁洁<sup>[10]</sup> 用第一性原理分析了 Cr 掺杂对  $\text{LiFePO}_4$  导电性能的影响, 并得出了与实验变化趋势相一致的结果.

关于掺杂对 InI 导电性能的影响迄今尚不十分清楚, 因此从理论上对其进行深入研究十分必要, 且具有重要的意义. Ge 具有较大的密度 ( $5.32 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ) 和载流子迁移率-寿命积 ( $\mu\tau$

\* 河北省应用基础研究计划重点基础研究项目 (批准号: 13961103D)、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)、河北省高层次人才资助项目 (批准号: C2013003040) 和燕山大学青年教师自主研究计划 (批准号: 13LGA011) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: xuzhaopeng@ysu.edu.cn

$> 1 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1}$ )<sup>[11]</sup>, 早在 20 世纪 70 年代高纯 Ge 已经取代锗锂探测器, 被用来制作室温探测器, 这使得更多不同类型探测器和复合探测器系统的发展成为可能<sup>[12]</sup>. 而目前还没有关于 Ge 掺杂对 InI 导电性影响方面的文献信息. 第一性原理计算已被广泛地应用于材料微观性能的研究, 并日益受到研究者的重视<sup>[13–15]</sup>. 本文通过第一性原理计算, 对不同浓度 Ge 掺杂的 InI 超原胞模型进行优化分析, 计算了进入导带的电子浓度和电子有效质量, 以及掺杂对 InI 最小光学带隙的影响, 分析了 Ge 掺杂对 InI 电阻率的影响. 所得结果对 Ge 掺杂 InI 的制备以及应用领域的开发具有指导作用.

## 2 模型构建和计算方法

### 2.1 理论模型

理想 InI 晶体是正交晶系类 TII 结构, 属于  $Cmcm(63)$  空间群, 计算使用的晶格常数为实验值:  $a = 0.475 \text{ nm}$ ,  $b = 1.276 \text{ nm}$ ,  $c = 0.491 \text{ nm}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ <sup>[1]</sup>, 本文采用的计算模型为 1 个 Ge 原子替换 1 个 In 原子的  $\text{In}_{0.875}\text{Ge}_{0.125}\text{I}$  ( $2 \times 1 \times 2$ ) 超原胞和两个 Ge 替换两个 In 原子的  $\text{In}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}\text{I}$  ( $2 \times 1 \times 2$ ) 超原胞. 计算了 InI 超原胞模型中 Ge 原子掺入不同相对位置的系统能量值, 得出最有可能掺入 Ge 原子的位置, 使系统能量最低, 结构最稳定. 还需要指出的是, 因建模采用替位掺杂对 InI 结构没有相变的影响.

### 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 (generalized gradient approximation, GGA) 平面波赝势方法, 所选赝势为超软赝势, 用 Perdew-Burke-Ernzerhof<sup>[16]</sup> 泛函描述. 用于构建赝势的电

子组态分别为 Ge  $4s^2 4p^2$ , In  $4d^{10} 5s^2 5p^1$  和 I  $5s^2 5p^5$ . 在不固定任何参数下进行几何优化, 截断能取 380 eV. 收敛条件为: 每个原子的能量变化在  $2.0 \times 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{atom}^{-1}$  以内, 原子最大受力不超过  $0.5 \text{ eV} \cdot \text{nm}^{-1}$ , 最大压力不超过 0.1 GPa, 最大位移不超过  $2.0 \times 10^{-4} \text{ nm}$ . 计算采用非自旋极化处理. 用第一性原理对超原胞模型进行计算分析, 得到总态密度分布和能带分布; 通过软件积分运算可得到进入导带的相对电子浓度; 通过在高对称  $Q$  点处对能量求二阶导数, 得出高对称点处的电子有效质量; 最后利用电子浓度和电子有效质量与迁移率、电导率的关系, 通过对比确认掺杂 Ge 对 InI 导电性能的影响.

## 3 计算结果与讨论

### 3.1 几何结构优化分析

掺杂前后的超原胞模型经几何结构优化计算后折合的晶胞参数、总能量及未掺杂 InI 的实验晶格常数值见表 1. 由表 1 所列数据知, 优化后  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  晶胞的晶格参数与实验值接近, 最大偏差小于 2.4%, 表征材料属性的  $c/a$  值也比较接近. 对比未掺杂情况, 掺杂 Ge 后的  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  晶胞体积随着掺杂量的增大而减小, 主要是由于  $\text{Ge}^{4+}$  的半径 (0.053 nm) 比替位的  $\text{In}^+$  半径 (0.132 nm) 小. 此外,  $\text{Ge}^{4+}$  替位  $\text{In}^+$  后产生多余的正电荷, 电荷之间的相互排斥作用增强, 使得 Ge 掺入后 InI 体积减小幅度不是很大, 晶格常数  $b$  稍微增大. 同时, 电荷间的排斥作用会造成  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  总能量的升高, 这与表 1 所列的  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  总能量  $E$  随 Ge 掺杂量的增加而增大相一致, 但是总能量的升高会使得  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  结构稳定性下降.

表 1 结构优化后  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  ( $x = 0, 0.125, 0.25$ ) 折合晶胞参数和总能量

|  | $a/\text{\AA}$      | $b/\text{\AA}$       | $c/\text{\AA}$      | $c/a$ | $V/\text{\AA}^3$ | $E/\text{eV}$ |
|--|---------------------|----------------------|---------------------|-------|------------------|---------------|
| InI  | 4.75 <sup>[3]</sup> | 12.76 <sup>[3]</sup> | 4.91 <sup>[3]</sup> | 1.033 | —                | —             |
|  | 4.82                | 12.98                | 4.96                | 1.029 | 623.33           | -14999.25     |
| $\text{In}_{0.875}\text{Ge}_{0.125}\text{I}$ | 4.87                | 13.22                | 4.74                | 0.973 | 614.65           | -13543.76     |
| $\text{In}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}\text{I}$   | 4.82                | 13.28                | 4.67                | 0.969 | 603.04           | -12088.91     |

### 3.2 相对电子浓度与迁移率分析

根据半导体物理学理论, 材料的导电性能可以用电导率来表征, 材料的电子电导率  $\delta_i$  公式为

$$\delta_i = n_i q \mu_i, \quad (1)$$

其中,  $n_i$  是电子浓度,  $q$  是电子电荷常量,  $\mu_i$  是电子迁移率. 从(1)式可以看出, 求出电导率需要先利用态密度求得电子浓度. 计算得到的未掺杂与掺杂后的InI半导体的总态密度如图1—图3所示. 图中VB表示价带, CB表示导带. 按一般的定义, 本征半导体的费米能级在禁带的中部附近, CASTEP软件定义的费米能级在能量为零的位置.

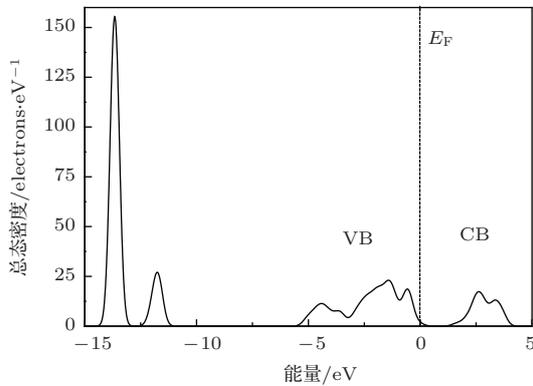


图1 未掺杂的InI超原胞的总态密度分布

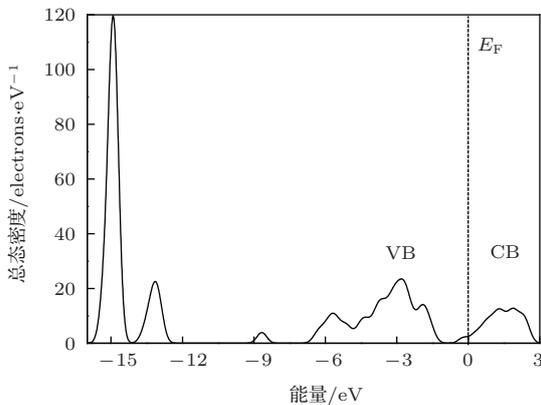


图2 In<sub>0.875</sub>Ge<sub>0.125</sub>I超原胞的总态密度分布

从图1—图3所示的总态密度可以看出, 未掺杂InI的费米能级在价带顶附近, 掺杂后费米能级均不同程度地进入了导带, 表明掺杂对InI的n型特性改变明显, 且掺杂后的InI均为高掺杂的n型简并半导体, 后面的分析会进一步证实该结论.

对比掺杂后的总态密度(图2和图3)可以看出, 不同掺杂量的费米面进入导带的程度不同, 说

明进入导带中的相对电子数浓度  $n_i$  也不相同. 利用origin分析软件对掺杂体系的电子态密度分布进行积分, 积分上限为费米能级值, 均为零, 积分下限为导带底能量. 计算得出In<sub>0.875</sub>Ge<sub>0.125</sub>I和In<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub>I超原胞中进入导带的电子浓度分别约为  $1.65 \times 10^{21}$  和  $3.98 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . 为了方便比较, 图4给出了Ge原子掺杂量与进入导带的相对电子数  $n_i$  的关系. 从图4可以看出, 随着掺杂浓度的增加, 进入导带中的相对电子浓度增大.

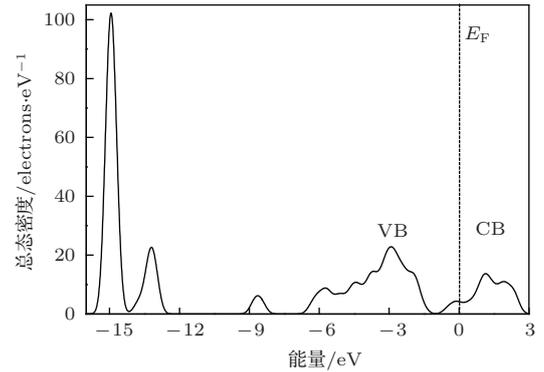


图3 In<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub>I超原胞的总态密度分布

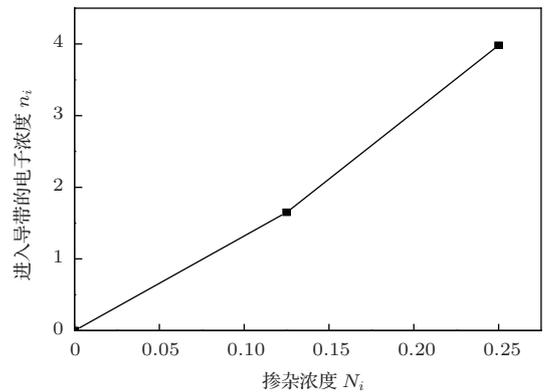


图4 掺杂浓度  $N_i$  与进入导带的电子浓度  $n_i$  的关系

由(1)式知, 电导率不仅与相对电子浓度有关, 还与材料的电子迁移率有关. 因此, 需要求出电子迁移率, 下面分析掺杂Ge对InI电子迁移率  $\mu_i$  的影响. 根据半导体物理学理论<sup>[17]</sup>可知, 在相同的条件下, 掺杂浓度为  $N_i$  的电离杂质与电子迁移率有如下关系:

$$\mu_i \propto \frac{q}{m_e^* \cdot N_i}, \quad (2)$$

其中  $m_e^*$  为电子有效质量. 由(2)式可知, 电子迁移率  $\mu_i$  与有效质量  $m_e^*$  和掺杂浓度  $N_i$  均成反比的关系, 即决定电导率的另一个重要参数是电子有效

质量.

### 3.3 有效质量与电导率分析

为了分析Ge掺杂对InI电子有效质量的影响,我们计算了不同Ge掺杂量的InI能带结构,如图5—图7所示.图5中计算得到的未掺杂时InI高对称点处能隙值为1.387 eV比实验能隙值(2.0 eV)小,这是由于GGA模型低估了激发态电子之间的关联关系,从而引起理论值比实验值偏小的共性问题<sup>[18]</sup>,但这不影响对InI掺杂体系的对比理论分析.由图6和图7可知,当Ge掺杂InI时,费米能级进入导带,同时高对称Q点处最小带隙宽度分别约为1.059, 0.952 eV,说明掺杂Ge浓度越高带隙越窄.

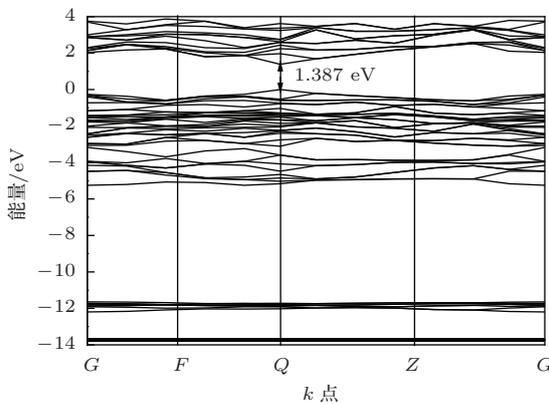


图5 未掺杂的InI能带结构

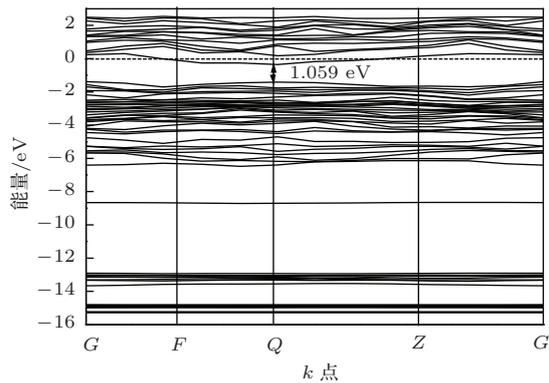


图6 In<sub>0.875</sub>Ge<sub>0.125</sub>I的能带结构

根据电子有效质量的计算公式,可得出导带底电子的有效质量 $m_e^*$ <sup>[19]</sup>:

$$m_e^* = \frac{h^2}{4\pi^2} \frac{d^2 E}{dk^2}, \quad (3)$$

其中,  $h$ 为普朗克常数,  $k$ 为波矢,  $E(k)$ 为波矢 $k$ 处所对应的电子能量. 根据In<sub>0.875</sub>Ge<sub>0.125</sub>I和In<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub>I超原胞的能带结构分布图,利用origin分析软件对掺杂体系高对称点Q处的电子有效质量进行计算. 计算得到In<sub>0.875</sub>Ge<sub>0.125</sub>I和In<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub>I在高对称点Q处导带中电子有效质量分别为 $1.51 \times 10^{-31}$ 和 $2.25 \times 10^{-31}$  kg. 结果表明,随着掺杂浓度的增加,导带中电子有效质量增大,这对提高材料的电子迁移率很不利.

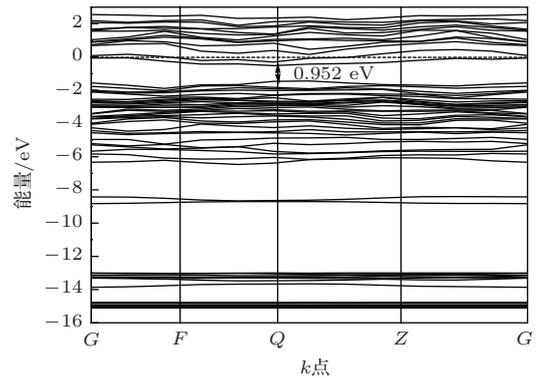


图7 In<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub>I的能带结构

根据(1)—(3)式,得到n型材料的电子电导率为

$$\delta_i = n_i q \mu_i \propto \frac{n_i}{m_e^* \cdot N_i}. \quad (4)$$

为更直观地看出掺杂浓度对InI电导率的影响,设In<sub>0.875</sub>Ge<sub>0.125</sub>I超原胞的电子迁移率为 $\delta_1$ , In<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub>I超原胞的电子迁移率为 $\delta_2$ . 由电导率公式类比得

$$\begin{aligned} \frac{\delta_1}{\delta_2} &= \frac{n_1 \cdot m_{e2}^* \cdot N_2}{n_2 \cdot m_{e1}^* \cdot N_1} \\ &= \frac{1.65 \times 10^{21} \times 2.25 \times 10^{-31} \times 16}{3.98 \times 10^{21} \times 1.51 \times 10^{-31} \times 8} = 1.23, \end{aligned}$$

结果表明,  $\delta_1 > \delta_2$ , 即在低温、高掺杂的条件下, Ge原子掺杂浓度越低导电率越高. 根据电子迁移率(2)式,得到In<sub>0.875</sub>Ge<sub>0.125</sub>I电子迁移率 $\mu_1$ 与In<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub>I电子迁移率 $\mu_2$ 之比为2.98,这说明随着Ge掺杂量的增加,其电子迁移率在降低,主要是源于不同掺杂浓度对散射的影响.

### 3.4 高掺杂与最小光学带隙分析

在半导体物理领域中,如果掺杂浓度数量级在 $10^{16}$ — $10^{18}$  cm<sup>-3</sup>时,被认为是轻掺杂,此时室

温下杂质全部电离, 迁移率随杂质的变化不大, 可以认为是常数; 当杂质浓度高于  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  时, 被认为是高掺杂的半导体, 杂质浓度对迁移率影响很大, 迁移率不是常数. 优化  $\text{In}_{0.875}\text{Ge}_{0.125}\text{I}$  和  $\text{In}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}\text{I}$  超原胞几何结构后, 发现两者的体浓度分别约为  $2.03 \times 10^{20}$ ,  $4.14 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . 结果表明, 掺杂后两者均为高掺杂的 n 型简并半导体. Ge 的掺入都导致费米能级进入导带区域, 费米能级以下所有导带态已被电子占据, 光吸收跃迁过程只能在价带态和费米能级附近及费米能级以上的导带空态之间发生. 这与前面总态密度的分析相一致.

对于 n 型简并半导体材料, 电子吸收光能从价带顶跃迁到费米能级所需要的最低能量即是电子跃迁的最小光学带隙. 这样, 图 6 和图 7 中得到的能隙值不再等于最小光学带隙值. 对于高掺杂半导体材料, 最小光学带隙值不仅与能带结构中的能隙值有关, 还与以下两个因素有关: 一方面, 由高掺杂引起的带隙变窄效应<sup>[20]</sup>的理论可知, 如果施主 Ge 原子浓度较小, 则禁带中的施主能级是分立的, 如果施主 Ge 原子浓度增加到  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  数量级时, 载流子冻析效应不再明显, 杂质能带进入导带, 并与导带相连, 形成了新的简并能带, 使能带的状态密度发生了变化, 简并能带的尾部伸入到禁带中, 产生尾带, 使禁带宽度变窄; 另一方面, 高掺杂引起的 Burstein-Moss (B-M) 效应<sup>[21]</sup>又同时会使禁带宽度增大. 这时材料的光学带隙值  $E_g^{\text{opt}}$  由下式决定:

$$E_g^{\text{opt}} = E_{g_0} + \Delta E_g^{\text{BM}} - \Delta E_g^{\text{W}}, \quad (5)$$

其中,  $E_{g_0}$  为未掺杂理想条件下的带隙值,  $\Delta E_g^{\text{BM}}$  为 B-M 移动造成的带隙增大宽度,  $\Delta E_g^{\text{W}}$  为禁带变窄效应引起的导带下移量. 结合图 5、图 6 和图 7 所示的能带计算结果以及 (5) 式, 得到纯 InI 及掺杂不同浓度 Ge 后体系的光学能隙值  $E_g^{\text{opt}}$ , 以及 B-M 移动的能隙增大量  $\Delta E_g^{\text{BM}}$  和禁带变窄效应引起带隙变窄量  $\Delta E_g^{\text{W}}$ , 具体结果如表 2 所列. 由表 2 可见, B-M 移动的能隙增大值比禁带变窄效应引起的带隙变窄量稍大一些, 计算得到 Ge 掺杂  $\text{In}_{0.875}\text{Ge}_{0.125}\text{I}$  和  $\text{In}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}\text{I}$  的光学带隙值分别为 1.411 和 1.469 eV, 与纯 InI 晶体光学能隙值相比各增大 0.024 和 0.062 eV. 因此, Ge 掺杂后使得  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  ( $x = 0.125, 0.25$ ) 体系有更大的光学带隙, 有利于核探测器在室温条件下工作时有较低的

漏电流.

表 2 InI 掺杂 Ge 前后的光学能隙值  $E_g^{\text{opt}}$  以及 B-M 移动的能隙增大量  $\Delta E_g^{\text{BM}}$  和禁带变窄效应引起的带隙变窄量  $\Delta E_g^{\text{W}}$

|                                    | InI   | $\text{In}_{0.875}\text{Ge}_{0.125}\text{I}$ | $\text{In}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}\text{I}$ |
|------------------------------------|-------|--|--|
| $\Delta E_g^{\text{BM}}/\text{eV}$ | 0     | 0.351  | 0.517                                      |
| $\Delta E_g^{\text{W}}/\text{eV}$  | 0     | 0.328  | 0.435                                      |
| $E_g^{\text{opt}}/\text{eV}$       | 1.387 | 1.411  | 1.469                                      |

## 4 结 论

本文采用基于密度泛函理论的平面波超软赝势计算方法, 研究了 Ge 掺杂对 InI 导电性能的影响. 计算结果表明: 在低温、高掺杂 Ge 原子的 InI 简并半导体条件下, 随着 Ge 掺杂量的增大, 材料体系的体积减小, 总能量升高, 稳定性降低; 掺杂 Ge 后能获得很好的 n 型材料改性, 体系的费米能级不同程度地进入了导带, 且随着掺杂浓度的增加, 进入导带中的电子浓度增大; Ge 掺入使  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  ( $x = 0.125, 0.25$ ) 体系的能带能隙值变小, 但是在 B-M 移动和禁带变窄效应的共同影响下, 体系的最小光学带隙稍有增大. 此外, 当 Ge 原子的掺杂量较大时, 电导率较小, 即影响核探测性能的电阻率增大, 较大的光学带隙和较高的电阻率都有利于减小探测器室温工作时的漏电流.

## 参考文献

- [1] Jones R E, Templeton D H 1955 *Acta Cryst.* **8** 847
- [2] Kolinko M I 1994 *J. Phys.: Condens. Matter* **6** 183
- [3] Shah K S, Moy L P, Zhang J, Misra M M, Moses W W 1992 *Proc. SPIE* **1734** 161
- [4] Oondera T, Hitomi K, Shoji T 2006 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **53** 3055
- [5] Nicoara I, Dicoara N, Bertorello C, Slack G A, Ostrogorsky A G, Groza M, Burger A 2011 *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **1341** 95
- [6] Hossain A, Kim K, Bolotnikov A E, Camarda G S, Gul R, Yang G, James R B 2013 *SORMA West Proceeding* Oakland, USA, May 13–17, 2012 pp5–20
- [7] Zhang W, Xu Z P, Wang H Y, Chen F H, He C 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 243101 (in Chinese) [张伟, 徐朝鹏, 王海燕, 陈飞鸿, 何畅 2013 物理学报 **62** 243101]
- [8] Xu Z P, Wang Y Z, Zhang W, Wang Q, Wu G Q 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 147102 (in Chinese) [徐朝鹏, 王永贞, 张伟, 王倩, 吴国庆 2014 物理学报 **63** 147102]
- [9] Di Lieto A 2003 *Opt. Lasers Eng.* **39** 309

- [10] Li X L, Chen J J 2011 *Metall. Funct. Mater.* **18** 44 (in Chinese) [李学良, 陈洁洁 2011 金属功能材料 **18** 44]
- [11] Lumb D H, Owens A, Bacdaz M, Peacock T 2006 *Nucl. Meth. Phys. Res. Sect. A* **568** 427
- [12] Luke P N, Amman M, Tindall C, Lee J S 2005 *J. Radioanal. Nucl. Chem.* **264** 145
- [13] Feng Q, Yue Y X, Wang W H, Zhu H Q 2014 *Chin. Phys. B* **23** 043101
- [14] Chen X R, Sun L L, Gou Q Q, Ji G F 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 017101
- [15] Jiang X F, Liu X F, Wu Y Z, Han J R 2012 *Chin. Phys. B* **21** 077502
- [16] Perdew J P, Chevary J A, Vosko S H 1992 *Phys. Rev. B* **46** 6671
- [17] Liu E K, Zhu B S, Luo J S 2003 *Semiconductor Physics* (6th Ed.) (Beijing: Publishing House of Electronics Industry) pp111, 129 (in Chinese) [刘恩科, 朱秉升, 罗晋生 2003 半导体物理学 (第六版) (北京: 电子工业出版社) 第 111, 129 页]
- [18] Zhang M, Zhang C H, Shen J 2011 *Chin. Phys. B* **20** 017101
- [19] Hou Q Y, Liu Q L, Zhao C W, Zhao E J 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 057101 (in Chinese) [侯清玉, 刘全龙, 赵春旺, 赵二俊 2014 物理学报 **63** 057101]
- [20] Liu E K, Zhu B S, Luo J S 1998 *Semiconductor Physics* (1st Ed.) (Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press) p78 (in Chinese) [刘恩科, 朱秉升, 罗晋生 1998 半导体物理学 (第一版)(西安: 西安交通大学出版社) 第 78 页]
- [21] Ji Z G 2005 *Semiconductor Physics* (Hangzhou: Zhejiang University Publishing House) p134 (in Chinese) [季振国 2005 半导体物理 (杭州: 浙江大学出版社) 第 134 页]

## First-principles study on the effect of Ge-doping on the conductivity of InI\*

Wang Yong-Zhen Xu Zhao-Peng<sup>†</sup> Zhang Wen-Xiu Zhang Xin Wang Qian Zhang Lei

(School of Information Science and Engineering, Key Laboratory for Special Fiber and Fiber Sensor of Hebei Province, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China)

( Received 9 July 2014; revised manuscript received 23 July 2014 )

### Abstract

The conductivities of InI with different concentrations of Ge-doping have been investigated by the ultra-soft pseudopotential approach of the plane-wave based on the density functional theory under the same condition. Models of the  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  ( $x = 0, 0.125, 0.25$ ) with In atoms substituted by different fraction of Ge are set up. The optimized structural parameters, total electron density of states, and energy band structures of Ge heavily doped  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  semiconductors at low temperature are calculated. Results show that the volumes are slightly reduced and the total energies are increased in the  $\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}$  systems and that the systems become instable. As the concentration of Ge increases, the electronic mobility decreases, but the relative number of electrons jumping to the conduction band increases, and the resistivity and the minimum optical band gap increase at the same time, which is beneficial to improving the performance of nuclear detection in the system.

**Keywords:** Ge heavily doped InI, resistivity, first-principles

**PACS:** 71.15.-m, 71.15.Mb, 72.15.-v

**DOI:** 10.7498/aps.63.237101

\* Project supported by the Key Basic Research Project of the Applied Basic Research Programs of Hebei Province, China (Grant No. 13961103D), the Innovation Project of the 46th Research Institute of China Electronics Technology Group Corporation, China (Grant No. CJ20120208), the High-level Talents Funded Projects of Hebei Province, China (Grant No. C2013003040), and the Young Teachers Independent Research Projects of Yanshan University, China (Grant No. 13LGA011).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: xuzhaopeng@ysu.edu.cn