

Al 和 N 共掺 p 型 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 电子结构的 第一性原理计算*

刘 强^{1)†} 程新路^{1)†} 杨向东¹⁾ 范勇恒³⁾

1) 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

2) 重庆工学院数理学院, 重庆 400054)

3) 中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 绵阳 621900)

(2008 年 2 月 1 日收到, 2008 年 9 月 16 日收到修改稿)

采用密度泛函理论下的第一性原理平面波超软赝势方法, 对 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 超晶胞和掺杂 Al, N 后的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 超晶胞分别进行了优化计算. 结合广义梯度近似计算了 Al 和 N 共掺杂后 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 的能带结构、电子态密度和 Mulliken 电荷布居分布. 计算表明, 掺入 N 原子的 2p 态电子为 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 价带顶提供空穴载流子, 使 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 价带顶向高能方向移动, 掺入 Al 原子的 3p 态电子则与 N 原子的 2p 态电子在费米能级附近发生轨道杂化, 使费米能级处价带能级展宽, Al 和 N 共掺杂可获得 p 型 $Zn_{1-x}Mg_xO$.

关键词: 密度泛函理论, $Zn_{1-x}Mg_xO$, 电子结构, 共掺杂

PACC: 7155M, 7120H

1. 引 言

$Zn_{1-x}Mg_xO$ 合金可用于提高紫外波段光电器件的发光效率, 如能获得 p 型 $Zn_{1-x}Mg_xO$, 就可制得 ZnO 基异质结光电器件和 ZnO 基多层量子阱^[1]. 由于 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 在光电技术方面的广泛应用, 对其电子结构、光学性质以及 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 的 p 型转变等方面已成为近年来的研究重点^[2].

近年来关于 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 的研究较多. 张德恒等^[3]研究了 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 带隙变化, Bhattacharya 等^[4]制备出宽带隙 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 合金薄膜, Sharma 等^[5]研究了 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 合金结构和光学特性, 刘红霞等^[6]用第一性原理研究了纤锌矿结构 $Zn_{1-x}Mg_xO$, Yang 等^[7]研究了 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 的 p-n 结电特性, 靳锡联等^[8]研究了不同量 Mg 掺杂 ZnO 合金的电子结构, 陈琨等^[9]研究了 In-N 共掺杂 ZnO 的电子结构. 简中详等^[1]研究制备了 Al 和 N 共掺 p 型 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜并对其光学性能进行研究, 但对 Al 和 N 共掺 p 型 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 的电子结构研究尚未见文献报道. 本文

根据第一性原理研究了 Al 和 N 共掺后 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 体系的电子结构.

2. 理论模型和计算方法

2.1. 理论模型

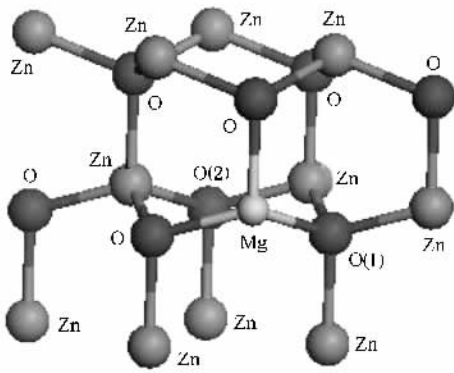
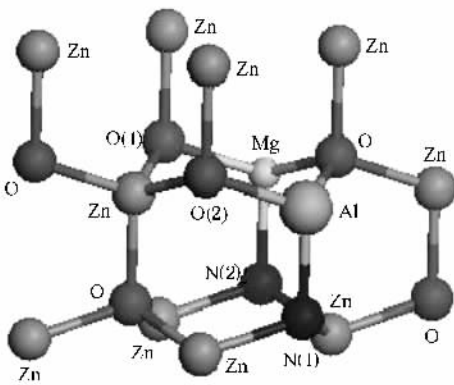
理想的 ZnO 呈六方纤锌矿结构, 属于 $P63mc$ 空间群, 对称性为 C_{6v4} , 晶格常数实验值 $a = b = 0.32498 \text{ nm}$, $c = 0.52066 \text{ nm}$, $c/a = 1.6021$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$, 晶胞体积为 0.047263 nm^3 ^[10]. 本文所有计算都基于超晶胞 ($2 \times 2 \times 1$) 模型.

用 Mg^{2+} 替代 ZnO 超晶胞 ($2 \times 2 \times 1$) 中一个 Zn^{2+} , 形成相应的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 模型(图 1). 掺杂比例为 12.5%. 与 Mg 原子相邻的 O 原子为 $\alpha(1)$, 与 Mg 原子次近邻为 $\alpha(2)$.

Al 和 N 在 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 模型的基础上按照 Al 原子与 N 原子之比为 1:2 的比例掺入(图 2). Al 原子替代一个 Zn 原子; $N(1)$ 原子替代位于 Al 的最近邻位置 O 原子, 形成 Al-N 原子对; $N(2)$ 原子替代位于

* 国家自然科学基金(批准号: 10676025)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: chengxl@scu.edu.cn

图 1 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 超晶胞图 2 Al 和 N 共掺 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 超晶胞

Al 的次近邻位置的 O 原子. Al 掺杂比例为 12.5% , N 掺杂比例为 25% ,此时系统能量最低 ,结构最稳定^[9,11].

2.2. 计算方法与优化说明

2.2.1. 计算方法

本文的计算工作均由 Material Studio 4.0 中的 CASTEP 软件包完成. CASTEP 软件是一个基于密度泛函理论(DFT)的从头计算量子力学程序,利用总能量平面波赝势方法,将离子势用赝势替代,电子波函数通过平面波基组展开,电子-电子相互作用的交换和相关势由广义梯度近似(GGA)处理.

2.2.2. 几何优化说明

为保证计算结果的准确,对所用几何结构采用 BFGS 算法进行优化.计算在 DFT 框架下进行,晶体电子结构计算结果与所选择基组有很大关系.为得到最优的计算结果,本文选择了 GGA-PBE, GGA-RPBE, GGA-PW91 和 LDA-CA-PZ 四个不同基组对 ZnO 晶体进行优化、计算单点能和晶胞参数并与其他人的理论值和实验值进行比较.优化迭代过程中能量收敛精度为平均每个原子 1×10^{-6} eV;作用在每个原子上的力不大于 0.2 eV/nm,内应力不大于 0.05 GPa,公差偏移为 0.0001 nm;电子赝势采用超软赝势(ultrasoft pseudopotential),电子波函数取截断能为 340 eV 的平面波基矢展开;交换-关联势计算在最小化快速傅里叶变换网格($45 \times 45 \times 40$)上进行;布里渊区积分采用 $5 \times 5 \times 5$ 的 Monkors-Park 特殊 K 点对全布里渊区求和,能量积分在倒易空间中进行;用于构建赝势的电子组态分别为 Zn $3d^{10}4s^2$, Mg $2p^63s^2$, Al $3s^23p^1$, O $2s^22p^4$, N $2s^22p^3$,计算时不考虑自旋极化效应.计算所得结果如表 1 所列.

表 1 不同基组对 ZnO 晶体晶胞参数、单点能计算结果

	LDA-CA-PZ	GGA-PW91	GGA-RPBE	GGA-PBE	文献 7 计算值	文献 10 实验值
a/nm	0.3182	0.3256	0.3287	0.3254	0.3197	0.3250
c/nm	0.5151	0.5258	0.5304	0.5246	0.5154	0.5207
c/a	1.619	1.615	1.613	1.612	1.612	1.602
$V/10^{-3}\text{nm}^3$	45.181	48.276	49.625	48.100	45.619	47.263
E/eV	-4300.385	-4311.679	-4313.679	-4315.424		
Zn—O 键长/nm				0.1989		

比较以上几种基组优化结果可以看出:GGA-PBE 计算得到的晶体能量最低、优化结构最稳定,其计算得出的晶胞参数最接近实验数据, c/a 误差为 0.6%,体积误差为 1.8%.本文以后涉及电子与电子的交换相互作用的计算均选用 GGA-PBE 交换关联函数处理.

3. 计算结果与讨论

3.1. 几何结构优化结果

3.1.1. ZnO 晶胞优化结果

ZnO 优化结果见表 1, GGA-PBE 计算结果与实验数据相符. c/a 误差在 0.6%, 体积误差在 1.8%, 表明计算参数选择合理. Zn—O 键长为 0.1989 nm.

3.1.2. $Zn_{1-x}Mg_xO$ 优化结果

$Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体优化后晶胞参数与文献 [8] 数据一致. $a = b = 0.32697$ nm, $c = 0.52655$ nm, $c/a = 1.6104$, $V_0 = 0.048754$ nm³.

$Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体结构与 ZnO 晶体结构相比发生了畸变, 主要体现在晶体结构中体系总能量和键长的改变上. $Zn_{1-x}Mg_xO$ 体系总能量为 -16509.526 eV, 比 ZnO 体系有所升高, 因为 Mg^{2+} 的半径小于 Zn^{2+} 的半径, Mg^{2+} 取代 Zn^{2+} 后在取代处形成点缺陷破坏了原有原子间作用力的平衡, 造成邻近原子偏离其平衡位置, 发生晶格畸变, 使晶格内能升高. 同时由于 Mg^{2+} 的半径为 0.06 nm, Zn^{2+} 的半径为 0.074 nm^[21], 形成的 Mg—O 键长为 0.1992 nm, 略大于 Zn—O 键长. 由于掺杂方式为原位替代, 所以 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体与 ZnO 晶体同构, 掺杂后 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体的对称性与 ZnO 晶体保持一致.

3.1.3. Al 和 N 共掺 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 优化结果

$Zn_{1-x}Mg_xO$ 掺杂 Al 和 N 优化后晶胞参数 $a = 0.32470$ nm, $b = 0.32468$ nm, $c = 0.52781$ nm, $c/a = 1.6255$, $V_0 = 0.047469$ nm³.

Al 离子取代 Zn 离子、N 离子替代 O 离子后, 由于 Al 离子和 Zn 离子、N 离子和 O 离子半径不一样, Al 和 N 共掺后 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体与掺杂前相比晶体结构发生畸变, 主要体现在体系总能量和键长的改变上. Al 和 N 共掺后体系的总能量为 -14518.150 eV, 与 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 体系的能量相比升高 12%, 这是由于 Al^{3+} 取代 Zn^{2+} 后多余正电荷之间相互排斥作用增加, 导致体系能量升高, 晶体结构的稳定性下降. 因为 Al^{3+} 半径 (0.053 nm) 小于 Zn^{2+} 半径, 所以掺杂后体积与掺杂前相比有所下降. Al 离子替代 Zn 离子和 N 离子替代 O 离子后形成的 Al—O 键长 (0.1772 nm), Al—N 键长 (0.1847 nm) 和 Zn—N 键长 (0.1929 nm) 均小于 Zn—O 键长, 优化结果符合量子化学理论.

由于掺杂方式为原位替代, 所以掺杂未改变晶体的对称性, $Zn_{1-x}Mg_xO$:Al-N 晶体与 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体同构.

3.2. $Zn_{1-x}Mg_xO$ 体系的电子结构

首先计算了 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 体系的电子结构, 包括

能带结构、总态密度、分波态密度和 Mulliken 电荷布居, 为分析 Al 和 N 共掺后 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 电子结构提供对比.

图 3 为 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 在费米能级附近的能带图, 图 4 为对应的总态密度图, 定义费米能级 $E_F = 0$ eV. 半导体性质主要由费米能级附近能带决定, 本文选 -6.2—9.5 eV 区域能带进行分析.

从图 3 可以看出: $Zn_{1-x}Mg_xO$ 价带顶与导带底间最可能的光跃迁出现在布里渊区 G 点位置, 属于直接带隙半导体. 带隙值 $E_g = 1.2$ eV, 与文献 [12] 的数据相符. 因为 DFT 是一个基态理论, 多粒子体系中激发态电子间的关联作用被低估^[13,14], 所以计算值比实验值要小^[3]. 对 ZnO 晶体而言主要是计算中过高地估计了 Zn 的 3d 电子能量, 造成 Zn 3d 与 O 2p 相互作用增大, 结果使价带带宽增大、带隙偏低, 但不影响对晶体电子结构的理论分析.

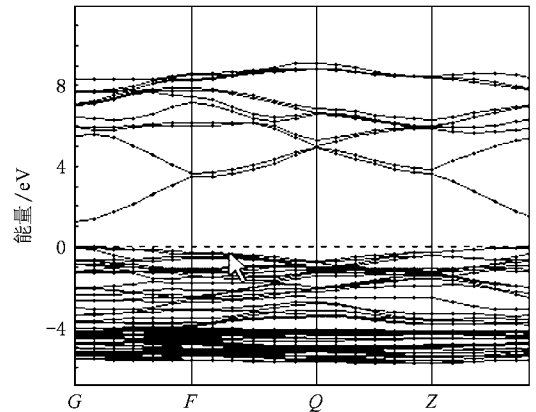


图 3 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 能带图

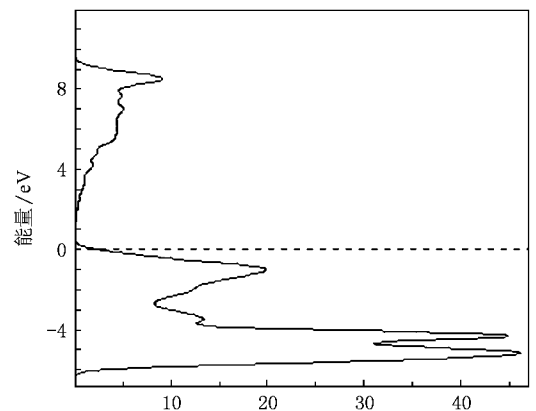


图 4 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 总态密度图

结合 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体的总态密度 (图 4) 和各原

子分波态密度(图 5)可知,费米能级附近的能带分布范围为 $-6.2 \sim 9.5$ eV. Mg 的 $2p$, $\alpha(1)$ 和 $\alpha(2)$ 的 $2s$ 态电子为孤立能带,其能量范围分别为 $-40.8 \sim$

-39.2 和 $-18 \sim -16$ eV, 与更高的占据态电子间的能隙分别为 21 和 10 eV. 在这两个能带与价带内其他能带间无明显相互作用,对 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 的物理性

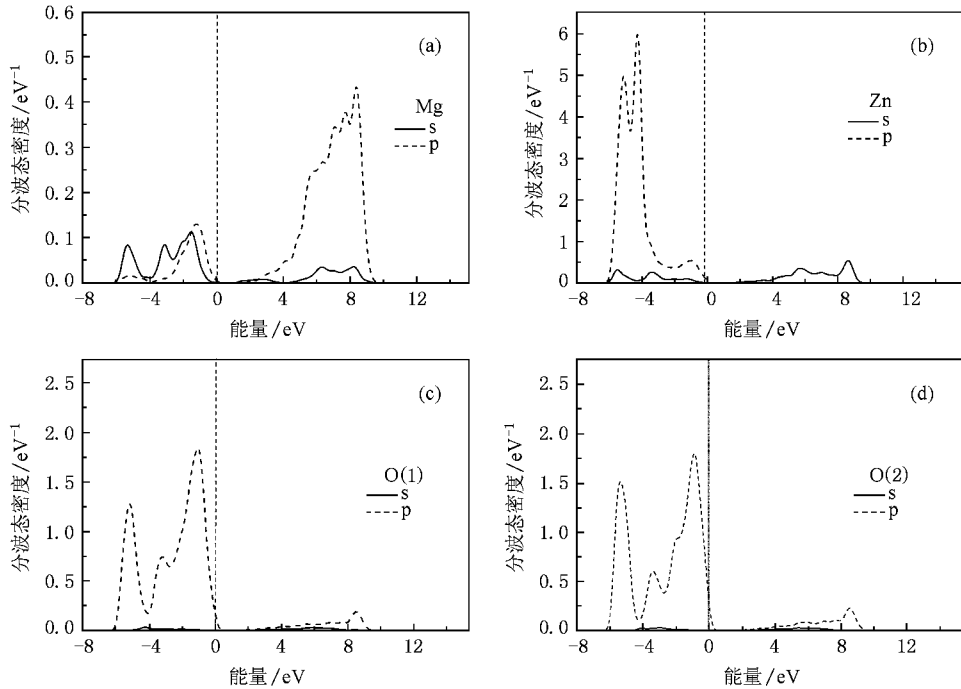


图 5 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体的 Mg, Zn, O 原子分波态密度图

质不起决定性影响.

表 2 为 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 的 Mulliken 电子布居情况, 从中可以看出各原子及其周围电子的分布得失情况. 由表 2 可知, 在 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体中 O 原子作为电

子受主得到电子, 最多得到电荷数为 $0.95e$, 最少得到电荷数为 $0.82e$; Zn 作为电子施主, 根据与 Mg 原子位置不同, 给出电荷可分为三种情况, 分别为 $0.76e$, $0.84e$ 和 $0.73e$; Mg 原子给出电荷为 $1.76e$.

表 2 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体的 Mulliken 电荷分布

原子	s 轨道电子	p 轨道电子	d 轨道电子	f 轨道电子	总电子	电荷/e
$\alpha(1)$	1.88	5.07	0.00	0.00	6.95	-0.95
$\alpha(2)$	1.88	5.07	0.00	0.00	6.95	-0.95
$\alpha(3)$	1.88	5.07	0.00	0.00	6.95	-0.95
$\alpha(4)$	1.85	4.97	0.00	0.00	6.82	-0.82
$\alpha(5)$	1.88	5.07	0.00	0.00	6.94	-0.94
$\alpha(6)$	1.85	4.97	0.00	0.00	6.82	-0.82
$\alpha(7)$	1.85	4.97	0.00	0.00	6.82	-0.82
$\alpha(8)$	1.85	4.97	0.00	0.00	6.82	-0.82
Mg	0.40	5.84	0.00	0.00	6.24	1.76
Zn(1)	0.49	0.78	9.98	0.00	11.24	0.76
Zn(2)	0.49	0.78	9.98	0.00	11.24	0.76
Zn(3)	0.49	0.78	9.98	0.00	11.24	0.76
Zn(4)	0.48	0.70	9.98	0.00	11.16	0.84
Zn(5)	0.52	0.78	9.98	0.00	11.27	0.73
Zn(6)	0.52	0.78	9.98	0.00	11.27	0.73
Zn(7)	0.52	0.78	9.98	0.00	11.27	0.73

3.3. Al 和 N 共掺杂后 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 体系的电子结构

图 6 为 Al 和 N 共掺杂后 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 在费米能级附近的能带图,图 7 为对应的总态密度图.本文对 -7 eV 到 9.4 eV 区域的能带结构进行分析,并与掺杂前进行对比.

从图 6 可以看出,费米能级附近能带分布范围为 -7 — 9.4 eV.掺杂后价带顶与导带底间的光跃迁在布里渊区 G 点位置,为直接带隙半导体,带隙值 $E_g = 0.7$ eV,与掺杂前相比禁带宽度变窄.

费米能级附近价带能级范围在 -7 — 0.8 eV,从分波态密度(图 8)可看出,主要由 $N(1)$, $N(2)$ 和 $\alpha(1)$, $\alpha(2)$ 的 $2p$ 态、 Zn $3d$ 态和 Al $3s$, $3p$ 态电子贡献.其中 Mg 的 $3s$, $3p$ 态电子也有少量贡献.价带顶主要由 $N(1)$, $N(2)$ 的 $2p$ 态电子贡献;从 -7 eV— -4 eV 的价带主要由 Zn 的 $3d$ 态电子和 $\alpha(1)$, $\alpha(2)$ 的 $2p$ 态电子贡献. $N(1)$, $N(2)$ 的 $2p$ 态、 Mg 和 Al 的 $3s$ 态电子对价带也有少量贡献.

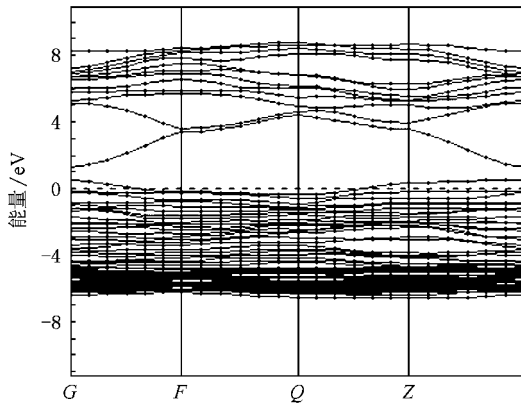


图 6 Al 和 N 共掺杂 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 能带图

与未掺杂前相比 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 掺杂后价带展宽,价带顶向高能方向移动达到 0.7 eV,费米能级处的态密度主要由 N 的 $2p$ 电子贡献.在费米能级处的电子态密度数达到 6. Al 和 N 共掺杂后 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 的 p 型效果明显,计算结果与实验一致^[1].

从 N 原子的分波态密度图可看出: $N(1)$, $N(2)$ 的 $2p$ 态电子大部分分布在费米能级附近很窄的能级中(a 峰),为 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 价带顶提供了空穴载流子,从而使价带顶向高能方向移动. N 的掺入使其近邻原子中费米能级附近的空穴数增加.对比掺杂前后各原子的分波态密度可知, Zn , Mg 和 $\alpha(2)$ 原子各轨道的电子分布范围基本保持不变,与 N 原子靠近

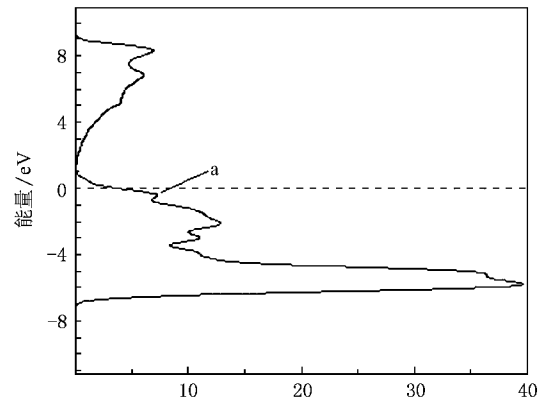


图 7 Al 和 N 共掺杂 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 总态密度

的 $\alpha(1)$ 原子在费米能级附近出现 a 峰,总体态密度图中也出现 a 峰.

对比 $N(1)$, $N(2)$ 的 $2p$ 态电子,可以看出 $N(1)$ 的电子态价带顶端的位置比 $N(2)$ 电子态价带顶端的位置略低.因为 Al 掺入后,Al 原子的 $3s$ 态电子与 $N(1)$ 原子的 a 峰低能端的电子态轨道杂化,使其向低能方向移动,Mulliken 电荷布居分析也证实了这一点. $N(2)$ 原子由于距 Al 原子较远,其能级保持较强的窄受主能级局域化特征.由此可见,Al 原子掺入后使 N 原子在费米能级处空穴间的相互排斥效应减弱,局域化程度降低,从而使价带能级展宽、系统能量降低,这样 N 原子更容易掺入 $Zn_{1-x}Mg_xO$.

费米能级附近导带能量范围为 1.5 — 9.4 eV.主要由 Zn 的 $4s$ 态电子、 Mg 和 Al 的 $2p$ 态电子、 $N(1)$, $N(2)$ 的 $2p$ 态电子贡献.导带底主要是 Zn 的 $4s$ 态电子贡献, Mg 和 Al 的 $2p$ 态电子也有少部分贡献. $\alpha(1)$, $\alpha(2)$ 的 $2p$ 态电子对导带有少部分贡献.与未掺杂前 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 相比,掺杂后由于 Al 的 $2p$ 态电子与 Zn 的 $4s$ 态电子的高能端杂化,使导带底向高能方向移动.

表 3 为 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 掺杂 Al 和 N 后的 Mulliken 电子分布情况.由表 3 可知 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体掺杂 Al 和 N 后,根据与 Al 原子位置不同,两种位置 N 原子得到的电荷分别为 $0.98e$ 和 $0.87e$; O 原子作为电子受主,最多得到电荷为 $0.99e$,最少得到电荷为 $0.80e$;根据与 Mg , Al 原子位置不同, Zn 原子贡献出的电荷分别为 $0.78e$, $0.73e$, $0.73e$, $0.79e$, $0.72e$ 和 $0.65e$; Mg 原子贡献电荷为 $1.79e$; Al 原子贡献电荷为 $1.15e$.对比 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 的电子布居可以看出, Zn , Mg , O 原子得失电子数基本上变化不大, Al 和 N 掺杂后 Al 的 $3s$ 电子大部分失去,而 p 电子仅失去

$0.06e$. 由此可以看出, Al 原子与 N 原子电子转移主要发生在 Al 的 $3s$ 电子轨道和 N 的 $2p$ 电子轨道之

间, 参与电子轨道杂化的是 Al 的 $3s$ 电子轨道与 N 的 $2p$ 电子轨道.

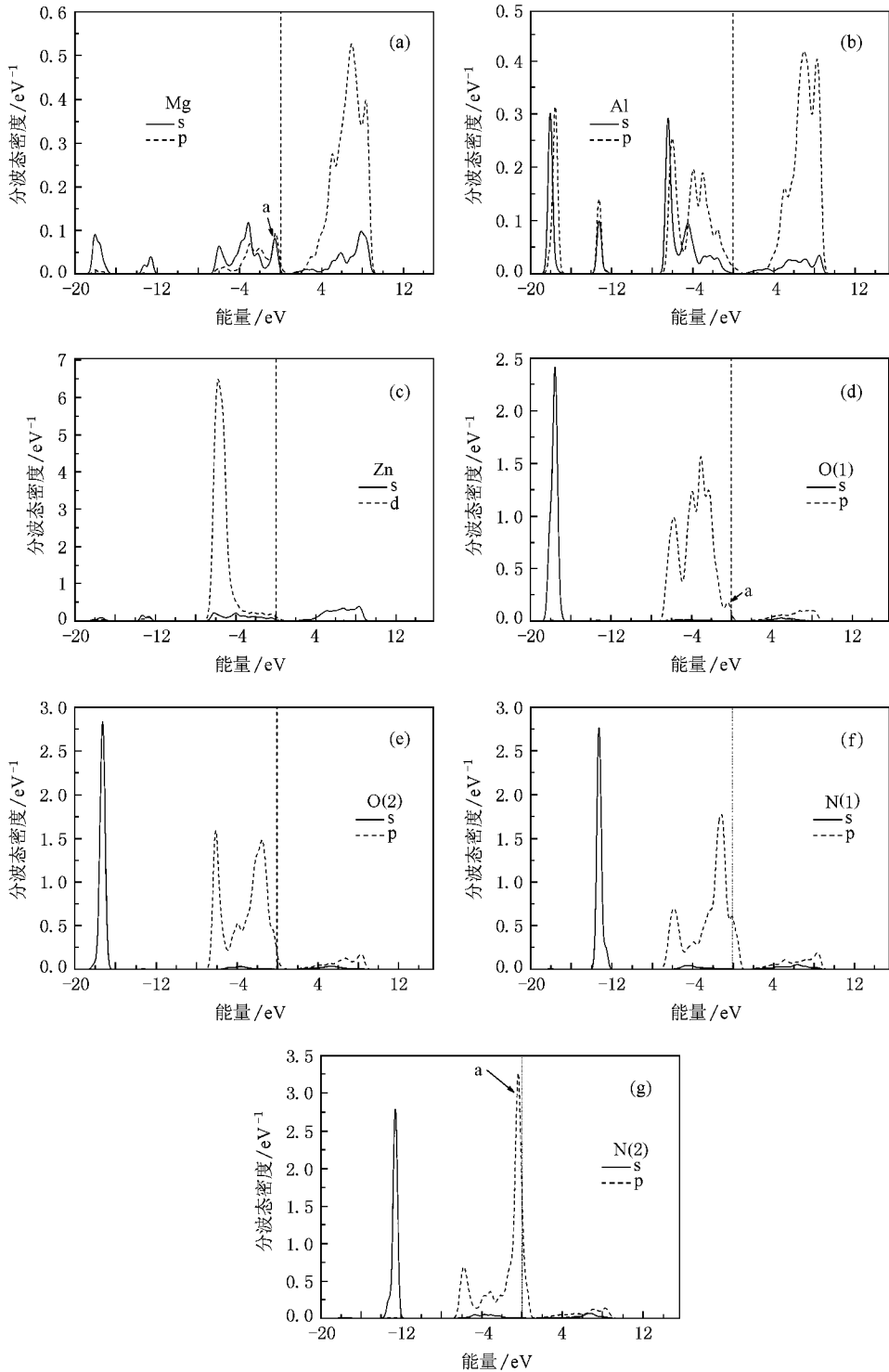


图 8 Mg, Al, Zn, O 和 N 原子分波态密度

表 3 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 晶体掺杂 Al 和 N 后的 Mulliken 电荷分布

原子	s 轨道电子	p 轨道电子	d 轨道电子	f 轨道电子	总电子	电荷/e
N(1)	1.72	4.26	0.00	0.00	5.98	-0.98
N(2)	1.73	4.15	0.00	0.00	5.87	-0.87
Al(1)	1.89	5.11	0.00	0.00	6.99	-0.99
Al(2)	1.89	5.10	0.00	0.00	6.98	-0.98
Al(3)	1.88	5.04	0.00	0.00	6.93	-0.93
Al(4)	1.88	5.06	0.00	0.00	6.94	-0.94
Al(5)	1.86	5.00	0.00	0.00	6.86	-0.86
Al(6)	1.85	4.94	0.00	0.00	6.80	-0.80
Mg	0.38	5.83	0.00	0.00	6.21	1.79
Al	0.79	1.06	0.00	0.00	1.85	1.15
Zn(1)	0.47	0.77	9.97	0.00	11.22	0.78
Zn(2)	0.48	0.83	9.96	0.00	11.27	0.73
Zn(3)	0.51	0.81	9.95	0.00	11.27	0.73
Zn(4)	0.51	0.76	9.94	0.00	11.21	0.79
Zn(5)	0.50	0.82	9.96	0.00	11.28	0.72
Zn(6)	0.57	0.84	9.94	0.00	11.35	0.65

4. 结 论

利用第一性原理计算了理想 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 共掺 Al 和 N 后的电子结构, 给出了能带结构、总态密度和各原子分波态密度和 Mulliken 电荷布居分析. 结果表明 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 的带隙在掺杂后变窄. N 的掺入

为 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 价带顶提供了空穴载流子, 从而使价带顶向高能方向移动. Al 掺入后其 $3s$ 电子与 N 原子在价带顶处 $2p$ 电子发生轨道杂化, Mulliken 电荷布居分析也证实了这一点. 电子轨道杂化使 N 的掺入变得容易进行. Al 和 N 共掺杂可以形成 p 型 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 半导体.

- [1] Jian Z X, Ye Z Z, Gao G H, Lu Y F, Zhao B H, Zeng Y J, Zhu L P 2007 *J. Semicond.* **28** 425 (in Chinese)[简中译、叶志镇、高国华、卢洋藩、赵炳辉、曾显嘉、朱丽萍 2007 半导体学报 **28** 425]
- [2] Zhang F C, Zhang Z Y, Yan J F, Zhang W H 2006 *Electron. Compon. Mater.* **25** 31 (in Chinese)[张富春、张志勇、阎军锋、张威虎 2006 电子元件与材料 **25** 31]
- [3] Zhang D H, Zhang X J, Wang Q P, Sun Z 2004 *Chin. J. Lumin.* **25** 111 (in Chinese)[张德恒、张锡健、王卿璞、孙征 2004 发光学报 **25** 111]
- [4] Bhattacharya P, Das R R, Katiyar R S 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 2010
- [5] Sarmah A K, Narayan J, Muth J F 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 3327
- [6] Liu H X, Zhou S M, Li S Z, Hang Y, Xu J, Gu S L, Zhang R 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1398 (in Chinese)[刘红霞、周圣明、李抒智、杭寅、徐军、顾书林、张荣 2006 物理学报 **55** 1398]
- [7] Yang H C, Li Y, Norton D P 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 172103
- [8] Jing X L, Lou S Y, Kong D G, Li Y C, Du Z L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4809 (in Chinese)[靳锡联、娄世云、孔德国、李蕴才、杜祖亮 2006 物理学报 **55** 4809]
- [9] 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、丁少锋 2008 物理学报 **57** 3138]
- [10] Abrahams S C, Bernstein J L 1969 *Acta Crystallogr. B* **25** 1233
- [11] Yamamoto T, Katayama Y H 2001 *Physica B* **302** 155
- [12] Yamamoto T 2002 *The Solid Film* **420** 100
- [13] Zhang J K, Deng H S, Jin H, Liu Y L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5371 (in Chinese)[张金奎、邓华胜、金慧、刘悦林 2007 物理学报 **56** 5371]
- [14] Vispute R D, Talyansky V, Choopun S 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 348

First-principles calculation of p- $Zn_{1-x}Mg_xO$ electronic structure by doping with Al and N^{*}

Liu Qiang¹⁾²⁾ Cheng Xin-Lu^{1)†} Yang Xiang-Dong¹⁾ Fan Yong-Heng³⁾

¹⁾ *Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China*

²⁾ *School of mathematics and physics, Chongqing Institute and Technology, Chongqing 400054, China*

³⁾ *Laser Fusion Research Center, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*

(Received 1 February 2008; revised manuscript received 16 September 2008)

Abstract

The first principles calculation of plane wave ultra-soft pseudo-potential method based upon the density functional theory and generalized gradient approximation have been adopted to investigate the energy band structure and electronic density of states and Mulliken charge population of Al and N codoped $Zn_{1-x}Mg_xO$. The calculation indicates that the Al and N codoped $Zn_{1-x}Mg_xO$ has the trend of forming p-type $Zn_{1-x}Mg_xO$.

Keywords : density functional theory, $Zn_{1-x}Mg_xO$, electronic structure, codoping

PACC : 7155M, 7120H

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10676025).

[†] Corresponding author. E-mail : chengxl@scu.edu.cn