

## In 掺杂 ZnTe 发光性能的第一性原理计算

令狐佳珺 梁工英<sup>†</sup>

(西安交通大学理学院, 西安 710049)

(2012年12月6日收到; 2013年1月24日收到修改稿)

利用基于密度泛函理论的第一性原理对 In 掺入 ZnTe 半导体后引入的各种缺陷进行了结构优化、能带和态密度分析及转换能级的计算. 计算结果表明: 掺杂后体系中主要存在两种缺陷, 一种是 In 原子替换了 Zn 原子的置换型缺陷; 另一种是由 In 替换 Zn 后再与临近的 Zn 空位形成的复合缺陷. 二者分别在导带下方 0.26 eV 和价带上方 0.33 eV 的位置形成各自的转换能级. 电子在这两个转换能级之间跃迁辐射出的能量大小与实验测量到的能量大小相符, 解释了原本发绿光的 ZnTe 在掺入 In 后发出近红外光的根本原因.

**关键词:** ZnTe, 半导体掺杂, 近红外光, 第一性原理

**PACS:** 31.15.E-, 74.62.Dh, 85.60.Jb

**DOI:** 10.7498/aps.62.103102

## 1 引言

近红外光自 1977 年被发现在特定波长区域可以穿透几厘米的生物组织后<sup>[1]</sup>, 就被用作光源发展出非侵袭性的近红外光谱<sup>[2]</sup>和弥漫性光学成像<sup>[3]</sup>等先进的技术手段, 广泛应用于神经元活动的测量<sup>[4]</sup>及癌症的探测和诊断<sup>[5]</sup>. 这类技术的核心是将发光波段在 650—900 nm 的发光半导体纳米结构送入人体, 再在体外接收透过的光来分析光谱或成像. 目前使用的光源大多为 PbS<sup>[6]</sup>和 CdTe<sup>[7]</sup>, 然而它们的毒性严重阻碍了此类技术的发展, 于是寻求新的发光材料就成为近些年来研究的热点.

最近, 有文献报道了掺入 In 的 ZnTe 可发出波长为 713 nm 的近红外光<sup>[8]</sup>, 这就意味着无毒的 ZnTe 有望作为近红外光的光源进入人体. ZnTe 是 II - VI 族半导体中重要的一员, 在室温和常压下具有闪锌矿结构和宽至 2.26 eV 的直接带隙, 广泛应用于激光器<sup>[9,10]</sup>、光波导<sup>[11]</sup>、光电探测器<sup>[12,13]</sup>、发光二极管<sup>[14]</sup>、太阳能电池<sup>[15]</sup>等方面. 理想 ZnTe 所发光是绿光, 掺入 In 后却发出近红外光, 说明 In 的掺入对其发光性能有着重要影响. 然而从实验中无法得知其内部结构和发光机制, 于是从理论角度来探究其发光机制就成为研究的重点.

以往利用第一性原理计算半导体的发光性能时, 都碍于不能算准带隙而只能从能带的变化趋势中获得定性的分析, 如 ZnO 的禁带宽度随 Mg 掺入量的增加而增加<sup>[16]</sup>; Co 和 Mn 共掺杂 ZnO 时可计算出禁带宽度有所减小<sup>[17]</sup>. 本文利用第一性原理方法, 采用近两年新提出的计算精度更高的杂化泛函来处理交换相关能, 对 In 掺杂 ZnTe 体系所引入各种缺陷的几何构型、能带结构、电子结构、形成能和转换能级进行了计算和分析, 并推测出 ZnTe 在掺杂后所发出的近红外光的本质来源.

## 2 计算方法

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 用 VASP 软件进行计算. 选用投影缀加波势 (projector augmented wave potentials, PAW) 来描述离子实和价电子的相互作用. 在电子组态的选取中, 由于 Zn 的 3d 电子对能带结构和材料性质影响巨大<sup>[18]</sup>, 仅考虑最外层的未充满壳层电子是不够的, 所以将 Zn 的 10 个 3d 电子和两个 4s 电子一并作为价电子处理. 而对于 Te 和 In 原子, 则都是选取其 5s 和 5p 轨道上的全部电子作为价电子. 在交换关联函数的选用上, 由于密度泛函理论从本质上就无法正确给出半导体的带隙<sup>[19,20]</sup>, 故本文中使用了并

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

比较了以下三种不同的交换相关函数: 广义梯度近似 (GGA), GGA + $U$  [21] 和杂化泛函 [22]. 其中杂化泛函由 25% 的哈特里 - 福克精确表达式和 75% 的广义梯度近似组成. 计算模型方面, 理想 ZnTe 的结构由  $2 \times 2 \times 2$  的含 64 个原子的超晶胞来模拟, 再通过添加、去除和移动原子来模拟具有不同缺陷的结构. 计算过程中, 截断能为 360 eV, 结构弛豫时固定了晶格常数来模拟孤立缺陷, 收敛条件为受力小于 0.01 eV/Å.

本文计算了能够表征缺陷形成难易度的缺陷形成能  $E_f$ , 其公式为

$$E_f(X) = E_{\text{tot}}(X) - E_{\text{tot}} - \sum n_i \mu_i, \quad (1)$$

式中,  $E_{\text{tot}}(X)$  为含有缺陷  $X$  的系统的总能量,  $E_{\text{tot}}$  是不带缺陷的系统的总能量,  $n$  为某种原子数目的变化,  $\mu$  为对应原子的化学势. 能量可以由计算直接得到, 而原子的化学势与材料合成的环境有关且受到一定的限制. 已有的实验 [8] 表明, 当 In 掺杂的浓度大于 1.86% 时, 体系中才出现微量新相  $\text{In}_3\text{Te}_4$ , 故本文中忽略新相的形成, 只考虑 Zn 和 Te 对化学势取值的影响. Zn 的化学势  $\mu_{\text{Zn}}$  有个最高限制为  $\mu_{\text{Zn}} = \mu_{\text{Zn}}(\text{bulk})$ , 这是在富 Zn 的合成环境中的 Zn 的最高值, 如果化学势高于这个值, 就不能形成 ZnTe 化合物而是形成 Zn 单质. 类似地, 在富 Te 环境中,  $\mu_{\text{Te}}$  的最高值为  $\mu_{\text{Te}} = \mu_{\text{Te}}^{(\text{bulk})}$ . 除了最高限制, 还有最低限制, 因为有如下反应式

$$\mu_{\text{Zn}} + \mu_{\text{Te}} = E_{\text{tot}}(\text{ZnTe}), \quad (2)$$

其中  $E_{\text{tot}}(\text{ZnTe})$  是 ZnTe 体材料中只有 Zn 和 Te 原子各一个时的总能量. 故当 Zn 取最高限制时, 即可得 Te 的最低限制

$$\mu_{\text{Te}}^{\text{min}} = E_{\text{tot}}(\text{ZnTe}) - \mu_{\text{Zn}}(\text{bulk}). \quad (3)$$

同样, Te 的最高限制亦对应着 Zn 的最低限制

$$\mu_{\text{Zn}}^{\text{min}} = E_{\text{tot}}(\text{ZnTe}) - \mu_{\text{Te}}(\text{bulk}). \quad (4)$$

### 3 结果与讨论

#### 3.1 ZnTe 晶体结构及缺陷形成能计算

表 1 给出了采用不同的交换相关能函数计算的晶格常数与键长的关系, 以及 Zn—Te 的键长, 从中可以看出, 从 GGA 到 GGA + $U$  再到杂化泛函, 相应计算出的晶格常数逐渐接近实验值, 说明了用杂化泛函方法计算晶格常数的精度最高, 其次为

GGA + $U$  法. 但在键长的计算上, 三种方法的结果非常接近. 由此可知, 采用不同的交换相关能函数对几何结构弛豫的影响不大, 可以认为是等效的. 故此对含缺陷的模型进行结构弛豫时, 统一采用计算量最小的 GGA 方法.

表 1 用不同交换相关能泛函算得的理想 ZnTe 晶格常数与键长

	GGA	GGA + $U$ ( $U = 8, J = 1$ ) <sup>[23]</sup>	杂化泛函	实验值
晶格常数/Å	6.205	6.195	6.16	6.101 <sup>[24]</sup>
Zn—Te 键长/Å	2.687	2.683	2.674	—

固定晶格常数后, 可在理想 ZnTe 的模型中添加或删除原子的方法来模拟具有孤立缺陷的体系. 图 1(a) 为理想 ZnTe 的  $2 \times 2 \times 2$  超晶胞结构图, 闪锌矿结构 ZnTe 中 Zn 和 Te 原子都处在对方的四面体间隙的位置, 且键长为 2.687 Å. 图 1(b) 为 In 原子替换 Zn 原子的置换型缺陷结构图; 图 1(c) 为删除一个 Zn 原子形成的 Zn 空位缺陷结构图; 图 1(d) 为包含置换型缺陷和空位的复合缺陷结构图.

经结构弛豫使各结构达到各自最稳定的状态后, 由 (1) 式来计算缺陷形成能, 结果如表 2 所示. In 替换了 Zn 形成  $\text{In}_{\text{Zn}}$  缺陷之后, 由于 In 有着比 Zn 更大的半径和比 Zn 多一个的外层电子, 故更强的库仑排斥力造成周围 Te 原子的向外移动, In—Te 键长为 2.850 Å, 比原本的 Zn—Te 键长增长了 6.07%. 形成能方面, 由于 In 与 Zn 电负性相近, 都易于失去电子成为阳离子并与阴离子成键, 故 In 替换 Zn 的缺陷有着很低的形成能, 即很容易形成. 特别是在富 Te 的环境中, 其形成能为负数, 说明此过程为放热反应. 本征缺陷中, Zn 空位  $V_{\text{Zn}}$  有着最低的形成能. Zn 的缺失, 会使其周围的 Te 原子因为库仑排斥力的消失而纷纷向空位方向移动, 移动的距离为原本 Zn—Te 键长的 4.15%. 为了测试孤立缺陷之间形成复合缺陷的可能性. 本文还构造了多个包含两个缺陷的体系并监控系统总能量与缺陷之间相对距离的关系. 结果说明两个缺陷处于最近邻位置时系统总能量最低, 说明两者间有相互作用即形成了复合缺陷. 复合缺陷中, 由一个  $\text{In}_{\text{Zn}}$  和一个  $V_{\text{Zn}}$  构成的复合缺陷  $\text{In}_{\text{Zn}}-V_{\text{Zn}}$ , 有着远低于其他复合缺陷的形成能, 特别是在富 Te 的环境中, 是仅次于  $\text{In}_{\text{Zn}}$  的很容易形成的缺陷. 上述的  $\text{In}_{\text{Zn}}$ ,  $V_{\text{Zn}}$  和  $\text{In}_{\text{Zn}}-V_{\text{Zn}}$  三种缺陷在 In 掺杂 ZnTe 体系中都较容易形成, 故作为研究重点. 而其他缺陷都有着相对高的形成能, 在实际中很难形成, 故在下文计算中不予考虑.

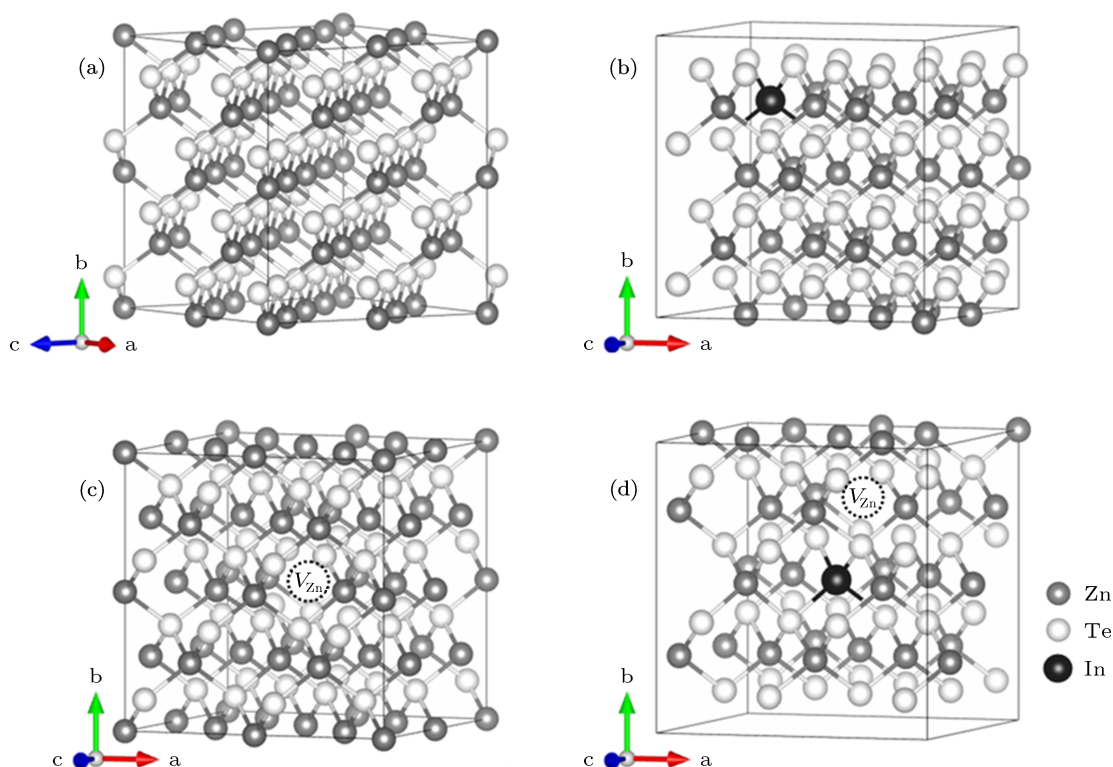


图1 几何结构图 (a) 理想 ZnTe; (b) In 替换 Zn; (c) Zn 空位; (d) In<sub>Zn</sub>-V<sub>Zn</sub> 复合缺陷

表2 掺 In 引入的各种缺陷的结构弛豫及缺陷形成能

缺陷	结构弛豫/%	缺陷形成能/eV	
		富 Zn	富 Te
In <sub>Zn</sub>	6.07	1.037	-1.084
In <sub>Te</sub>	3.20	3.156	4.177
In <sub>i</sub>	8.75	3.037	3.037
V <sub>Zn</sub>	-4.15	1.54	0.319
V <sub>Te</sub>	-1.84	2.15	3.371
In <sub>Zn</sub> -V <sub>Zn</sub>	—	1.724	-0.718
In <sub>Zn</sub> -V <sub>Te</sub>	—	3.045	3.045
In <sub>Te</sub> -V <sub>Te</sub>	—	5.347	7.789

注: 结构弛豫一栏中, 正数表示原子以缺陷为中心向外移动, 负数表示向内移动

### 3.2 In 掺杂后 ZnTe 的能带与电子结构

异族掺杂元素会在原体系能带结构中引入新的杂质能级, 图 2 表示了理想 ZnTe 和不同缺陷对应的能带结构图. 图 2(a) 为理想 ZnTe 的能带结构, 从中可以直观地看到 ZnTe 是直接带隙半导体, 其价带顶和导带底都在中心的  $\Gamma$  点上. 其带隙为

1.25 eV, 几乎是实验值 2.26 eV 的一半, 这也验证了 GGA 会严重低估半导体带隙的现象, 但是这并不影响能带形状的正确性. 相比起图 2(a), 图 2(b) 在导带下方多出了一个能级, 这是 In 比 Zn 多了一个电子而产生的施主能级. 图 2(c) 中价带顶上方的新能级是 Zn 空位易束缚自由电子而造成的受主能级. 图 2(d) 中同时包含了上述两个杂质能级, 是复合缺陷 In<sub>Zn</sub>-V<sub>Zn</sub> 中两者有相互作用的结果.

图 3 为各种缺陷的投影态密度图. 图 3(a) 为理想 ZnTe 的投影态密度图, 说明了其价带顶主要来源于 Te 的 5p 电子的贡献, 而导带底主要是 Zn 的 4s 电子的贡献. 同时 Zn 的 3d 电子在价带顶处也有不可忽略的作用, 故需要将满壳层的 Zn 的 3d 电子全部作为价电子参与计算. 图 3(b) 为 In 替换 Zn 的投影态密度图, 显而易见, 其施主能级来源于 In 的 5s 电子和其周围 Te 的 5p 电子的贡献, Zn 原子几乎没有贡献. 图 3(c) 为 Zn 空位的投影态密度图, 从中可知其受主能级来源于空位周围 Te 原子的 5p 电子. 图 3(d) 中复合缺陷的投影态密度图再一次验证了两个缺陷之间有相互作用, 两个代表杂质的峰都基本保持着原有的形状, 却在位置上有了些许变化, 相对距离减小了.

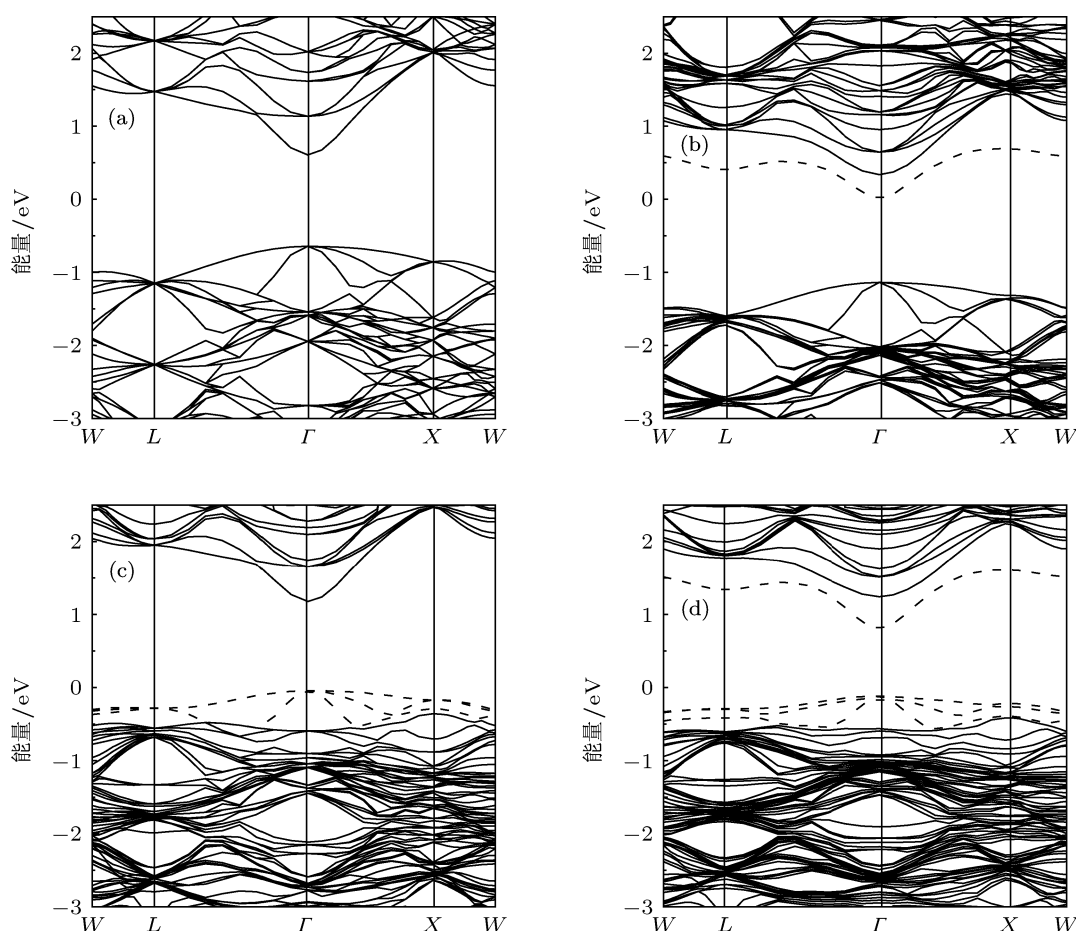


图2 能带结构 (a) 理想 ZnTe; (b) In 替换 Zn; (c) Zn 空位; (d) In<sub>Zn</sub>-V<sub>Zn</sub> 复合缺陷; 其中杂质能级由虚线表示

### 3.3 In 掺杂引入的转换能级及其对 ZnTe 发光性能的影响

掺杂对于半导体的影响不仅是在能带结构中引入了杂质能级, 还会在带隙中引入转换能级, 使原本导带与价带之间的电子跃迁变为转换能级之间的跃迁, 从而改变辐射波长, 影响半导体的发光性能. 转换能级的位置可由带电缺陷形成能给出,

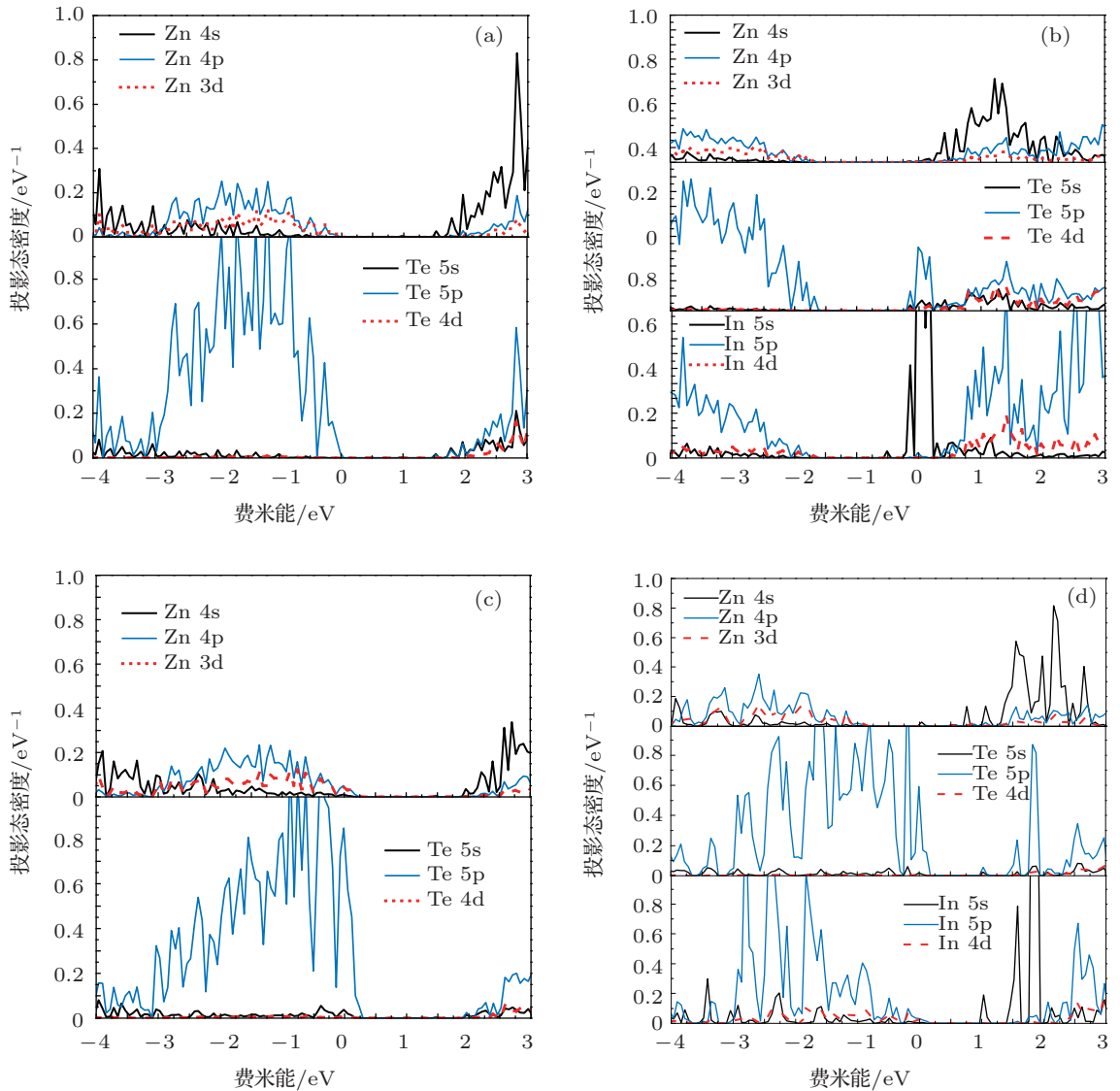
带电缺陷形成能的定义如下

$$E(X^q) = E_{\text{tot}}(X^q) - E_{\text{tot}} - \sum n_i \mu_i + q(E_F + E_V + \delta V), \quad (5)$$

式中  $E_V$  为价带顶的位置, 在此作为势能参考零点;  $E_F$  为相对于价带顶的费米能级, 会由 0 变化至带隙大小;  $\delta V$  这一项用来对齐含有缺陷和没有缺陷体系的价带顶位置, 以保证所有计算都在同一个势能参考点上进行.

表3 GGA, GGA +U 和杂化泛函方法所得 In<sub>Zn</sub>, V<sub>Zn</sub> 和 In<sub>Zn</sub>-V<sub>Zn</sub> 的带电缺陷形成能

	带电量	GGA		GGA +U		杂化泛函	
		价带顶	导带底	价带顶	导带底	价带顶	导带底
In <sub>Zn</sub>	0	-0.200	-0.200	-0.497	-0.497	0.579	0.579
	1	-1.310	-0.060	-1.716	-0.193	-1.415	0.838
V <sub>Zn</sub>	0	1.046	1.046	0.557	0.557	2.933	2.933
	-1	1.259	0.009	0.838	-0.685	3.201	0.948
	-2	2.063	-0.437	1.028	-2.018	4.277	-0.229
In <sub>Zn</sub> -V <sub>Zn</sub>	0	-0.718	-0.718	-1.545	-1.545	1.174	1.174
	-1	-0.523	-1.773	-1.295	-2.818	1.503	-0.750


 图3 投影态密度 (a) 理想 ZnTe; (b) In 替换 Zn; (c) Zn 空位; (d)  $\text{In}_{\text{Zn}}\text{-V}_{\text{Zn}}$  复合缺陷

本文用 GGA, GGA + $U$  和杂化泛函三种方法计算了  $\text{In}_{\text{Zn}}$ ,  $\text{V}_{\text{Zn}}$  和  $\text{In}_{\text{Zn}}\text{-V}_{\text{Zn}}$  这三种主要缺陷的带电缺陷形成能, 如表 3 所示 (富 Zn 与富 Te 情况下得到的形成能数值不同, 但推出的转换能级相同, 故在此只列出富 Te 情况下的数据).

得到每个带电缺陷的形成能后, 同种缺陷不同价态的转换能级, 即使两个带不同电荷量的同种缺陷获得相同形成能大小的费米能级的位置. 其计算公式为

$$\varepsilon\left(\frac{q_1}{q_2}\right) = \frac{E_{\text{F}}(X^{q_1}) - E_{\text{F}}(X^{q_2})}{q_2 - q_1}. \quad (6)$$

图 4 表示了三种不同交换相关能泛函算得的带隙及转换能级. 在图 4(a) 中, Zn 空位由于可以束缚两个电子, 有三种不同的价态: 0 价, -1 价和

-2 价, 故有两个转换能级  $\varepsilon(0/1-)$  和  $\varepsilon(1-/2-)$  在价带顶的上方. 复合缺陷  $\text{In}_{\text{Zn}}\text{-V}_{\text{Zn}}$  中  $\text{In}_{\text{Zn}}$  可以贡献一个自由电子, 而  $\text{V}_{\text{Zn}}$  可以束缚两个自由电子, 故总体的效果是在价带顶上方有一个转换能级  $\varepsilon(0/1-)$ .  $\text{In}_{\text{Zn}}$  可以失去一个电子电离, 故在导带下方有一个转换能级  $\varepsilon(0/1+)$ . 值得一提的是, 转换能级与带隙和费米能直接相关, GGA 的方法会低估带隙也就会低估转换能级 [25]. 从图 4(b) 中可以看出, 采用 GGA + $U$  的方法, 算得的带隙为 1.52 eV, 比用 GGA 算得的 1.25 eV 大了一些, 却仍然与实验值 2.26 eV 相去甚远. 此外, GGA + $U$  的方法算出 Zn 空位的 0 价会直接变为 -2 价, 而 -1 价不能稳定存在. 这与 GGA 的结果有着本质的不同, 且与实验观察的结果 [26] 相矛盾. 而采用杂化泛函

法来描述交换相关能,如图 4(c) 所示,算得的带隙为 2.25 eV,与实验值相符得非常好. Zn 空位 -1 价到 -2 价的转换能级位置在价带顶上方 1.08 eV 处,也与实验值<sup>[27]</sup> 极其相近. 这说明了 GGA +U 的方法应用在 ZnTe 体系上并不能很好地改善 GGA 的计算结果,而杂化泛函却能正确地描述交换相关能,并精确地得出带隙大小及转换能级的位置. 利用杂

化泛函再算得 In<sub>Zn</sub> 的转换能级  $\epsilon(0/1+)$  在导带下方 0.26 eV 处; In<sub>Zn</sub>-V<sub>Zn</sub> 的转换能级  $\epsilon(0/1-)$  在价带顶上方 0.33 eV 处,故电子在这两个转换能级之间跃迁时放出的能量为 1.67 eV,与所观察到的近红外光的能量 1.74 eV 所差无几,故可认为是此 713 nm 近红外光的本质来源.

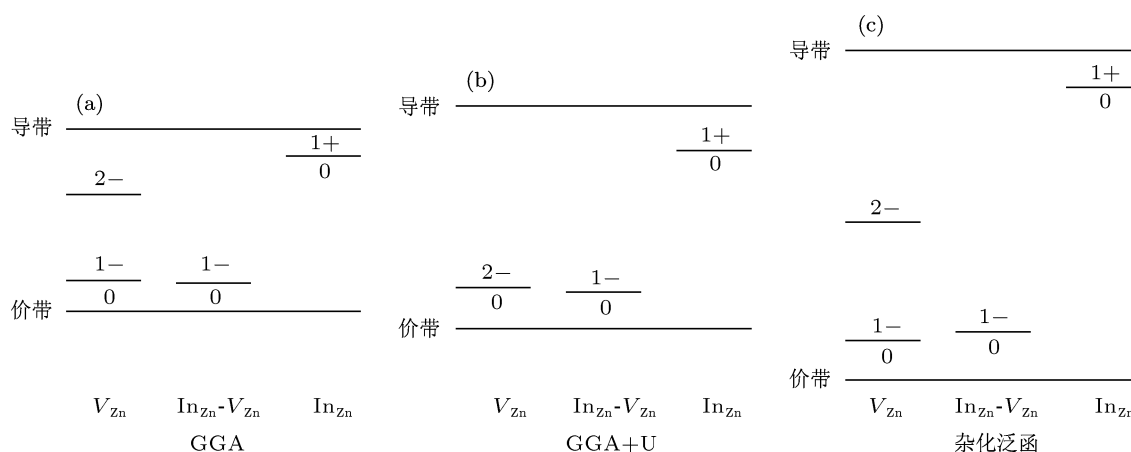


图 4 三种不同交换相关能泛函算得的带隙及转换能级

## 4 结论

本文利用第一性原理,采用三种不同的方法来处理交换相关能,计算并分析了 In 掺入 ZnTe 后形成的各种缺陷的几何结构与形成能、能带结构与电子结构、转换能级与发光性能. 结果表明 GGA 可用于计算优化几何结构及分析能带和电子结构,但在计算带隙及转换能级时完全不可用. GGA +U 的修正作用在 ZnTe 体系上并不明显,而杂化泛函能很精确地计算半导体的带隙和各种缺陷的转换能级位置. 用杂化泛函方法计算的结果为: In 原子

易于处于 Zn 原子的位置,形成替换型缺陷 In<sub>Zn</sub>,并在带隙中引入一个由 In 的 5s 电子和 Te 的 5p 电子贡献的施主能级;同时 In<sub>Zn</sub> 又容易与本征缺陷 Zn 空位形成复合缺陷 In<sub>Zn</sub>-V<sub>Zn</sub>,二者各自在导带下方 0.26 eV 处和价带顶上方 0.33 eV 处形成相应的转换能级,电子在这两个转换能级之间的跃迁就是实验中所观察到的 713 nm 近红外光的来源.

感谢新加坡国立大学冯元平教授和蔡永青博士对本论文提出的宝贵建议.

[1] Jobsis F F 1977 *Science* **198** 1264  
 [2] Hebdeny J C, Arridge S R, Delpy D T 1997 *Phys. Med. Biol.* **42** 825  
 [3] Gibson A P, Hebden J C, Arridge S R 2005 *Phys. Med. Biol.* **50** R1  
 [4] Franceschini M A, Boas D A 2004 *Neuro Image* **21** 372  
 [5] Colak S B, van der Mark M B, Hooft G W, Hoogenraad J H, van der Linden E S, Kuijpers F A 1999 *J. Select. Topics in Quantum Electron.* **5** 1143  
 [6] Hines M A, Scholes G D 2003 *Adv. Mater.* **15** 1844  
 [7] Maestro L M, Ramirez-Hernandez J E, Bogdan N, Capobianco J A, Vetrone F, Garcia Sole J, Jaque D 2012 *Nanoscale* **4** 298  
 [8] Zhou W C, Tang D S, Pan A L, Zhang Q L, Wan Q, Zou B S 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 1415  
 [9] Haase M A, Qiu J, DePuydt J M, Cheng H 1991 *Appl. Phys. Lett.* **59** 1272  
 [10] Pan A L, Liu R B, Zhang Q L, Wan Q, He P B, Zacharias M, Zou B S 2007 *J. Phys. Chem. C* **111** 14253  
 [11] Pan A L, Liu D, Liu R B, Wang F F, Zhu X, Zou B S 2005 *Small* **1** 980  
 [12] Singh A, Li X Y, Protasenko V, Galantai G, Kuno M, Xing H, Jena D 2007 *Nano Lett.* **7** 2999  
 [13] Liu R, Gu C M, He L R, Wu S, Shen W Z 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1217 (in Chinese) [刘锐, 顾春明, 贺莉蓉, 吴森, 沈文忠 2004 物理学报 **53** 1217]  
 [14] Sato K, Asahi T, Hanafusa M, Noda A, Arakawa A, Uchida M, Oda O, Yamada Y, Taguchi T 2000 *Phys. Stat. Sol. A* **180** 267  
 [15] Bozzini B, Bader M A, Cavallotti P L, Cerri E, Lenardi C 2000 *Thin Solid Films* **361** 388  
 [16] Huang D, Shao Z Y, Chen D H, Guo J, Li G X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1078 (in Chinese) [黄丹, 邵元智, 陈弟虎, 郭进, 黎光旭 2008 物

- 理学报 57 1078]
- [17] Bi Y J, Guo Z Y, Sun H Q, Lin Z, Dong Y C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7800 (in Chinese) [毕艳军, 郭志友, 孙慧卿, 林竹, 董玉成 2008 物理学报 57 7800]
- [18] Lee G D, Lee M H, Ihm J 1995 *Phys. Rev. B* **52** 1459
- [19] Anisimov V I, Solovyev I V, Korotin M A 1993 *Phys. Rev. B* **48** 16929
- [20] Chen K, Fan G H, Zhang Y 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1054 (in Chinese) [陈琨, 范广涵, 章勇 2008 物理学报 57 1054]
- [21] Dudarev S L, Botton G A, Savrasov S Y, Humphreys C J, Sutton A P 1998 *Phys. Rev. B* **57** 1505
- [22] Shimazaki T, Asai Y 2010 *J. Chem. Phys.* **132** 224105
- [23] Karazhanov S Z, Ravindran P, Kjekhus A, Fjellvåg H, Grossner U, Svensson B G 2006 *J. Cryst. Growth* **287** 162
- [24] Weast R C, Astle M J, Beyer W H 1988 *CRC Handbook of Chemistry and Physics* (1st Ed.) (Boca Raton, FL: CRC Press) p46
- [25] Komsa H P, Pasquarello A 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 191901
- [26] Watkins G D 1996 *J. Cryst. Growth* **159** 338
- [27] Ribeiro C A, Pautrat J L 1973 *Solid State Commun.* **13** 589

# First-principles study on the luminescence property of In-doped ZnTe

Linghu Jia-Jun Liang Gong-Ying<sup>†</sup>

(School of Science, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(Received 6 December 2012; revised manuscript received 24 January 2013)

## Abstract

First-principles theory is adopted to analyze the characteristics of defects in ZnTe induced by In doping. The geometry structures, formation energies, band structures, densities of states and transition levels of the defects are calculated. The results show that there are two kinds of major defects in In-doped ZnTe. One is the atomic substitution defect of Zn replaced by In, which gives rise to a transition level located at 2.6 eV beneath the conduction band. The other is a complex defect, consisting of one In substituting Zn and one nearby Zn vacancy, which results in a transition level 0.33 eV higher than the top level of valance band. Electron transition between these two transition levels can be regards as the origin of the near-infrared light observed experimentally in In-doped ZnTe.

**Keywords:** ZnTe, semiconductor doping, near-infrared, first-principles

**PACS:** 31.15.E-, 74.62.Dh, 85.60.Jb

**DOI:** 10.7498/aps.62.103102

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: gyliang@mail.xjtu.edu.cn