Metal-Dimer Atomic Reconstruction Leading to Deep Donor States of the Anion Vacancy in II-VI and Chalcopyrite Semiconductors

S e a La a d A e Z, e
National Renewable Energy Laboratory, Golden, Colorado 80401, USA
(Rece ed 13 A 2004; , b ed 5 Oc be 2004)

F - c e a -e e ca c, a e ea a e ca a c ec , c de a , d a aca c e II-VI a d c a c ec , d e , e a ea d e . A a c e , e ce, e e, a Se aca c a a , e ec ed e Z Se a 6.6410.5257 C5( )-2Z 2(c) 17eac a c e

DOI: 10.1103/P Re Le .93.156404 PACS , be : 71.15.Mb, 71.20.N , 71.55.G

Vaca c e a e e , da e a de ec d , c ec a ca e e e a [1]

de de e e e a aca c e a c , c , e, e e ec c , c , e (e- a c e de ec e e), de ec a e e *H*

f (c . e. ., Re . [10]), a d ca a e e e . T e a -e e *E* a d a c ce e e ca c, a ed e e, d e a - e , ace a [16] e ca de a a (LDA) de , c a e . We , e e Ce e e -A de LDA e c a e c e a e a a a e e ed b Pe de a d Z, e [17] a d ec- a, e ed a e e a a e e ed e VASP c de [18]. T e e e c, e a e- a e e a a 280 eV, a d B , e e a e e e ed a $3\times3\times3$ e , e ed e a ed e d. I ca e e c a ed aca c e , e , , e ac e d c a e c a e c - ec ed $O(L^{-5})$ [19], e e L e ea , e ce d e . We , e e e e e a a ce c a

Z Se a d $CuGaSe_2$ [20]. T e LDA ba d a e
c ec ed b ac ed a e ca *d* a e

e e e- a c e e e e $a_1(a)$ b a Z Se ($CuGaSe_2$) $E_v + 1.1$ eV ($E_v + 0.2$ eV), be e e a a $E_v + 0.2$ eV ($E_v - 2.5$ eV), a e e a a . T , a , a ed e , e a e F . 1, a e e a a , e d , b cc ed a_1^2 e e ca ed Z Se , ab e e VBM, e ea $CuGaSe_2$ dee *inside* e a e ce ba d. W e V_{Se}^0 ed ce, e e a_1^0 c , a V_{Se}^{2+} (F . 1), a b ea , e e a - e a d e (Tab e I), a d a e , e a T_d a ce e (F . 1, b). T e e- a c e e e e e e a_1 a e Z Se e *up* $E_v + 0.2$ eV (V_{Se}^0) $E_v + 2.5$ eV (V_{Se}^{2+}), e ea $CuGaSe_2$ e *up* $E_v - 2.5$ eV (V_{Se}^0) $E_v +$ 1.5 eV (V_{Se}^{2+}) [20]. T a a c e a a e d ce e e ca be , d ed e ac a e ec a c e ec , .e., e e e e e ec c C , b e , d e e a_1^2 (V_{Se}^0) $\rightarrow$ a_1^0 (V_{Se}^{2+}) a - , , d a e d aced e a_1 e e a d *lower* e e e . Beca e e c a e a e de e de e de ec e e *below* VBM *above* e VBM, e Se aca c c a c e ca a , e a e a ab e c , a , c e ec a e a e ed e VBM e dee de ec e e , e ea ee e . T , e Se aca c ca e a e e e -