

Intrinsic Transparent Conductors without Doping

Xi e Zha g,¹ Lij Zha g,¹ J h D. Pe i,² a d A e Z ge^{1,*}

¹ 80309, A
² 80401, A

(Received 27 Ma 2015; b i hed 23 Oc be 2015)

Ta ae c dc (TC) c bi he a c ai dicai ed e ie fe ec fica c dc i i i i h i ca f a a e c a d a e g e a ade b t a i g i h a f a a e i a i a d a i g i c d c i e ia hea d i g, a a ach ha ge ea face e e "d i g b u e ec." We : ea diffe e i idea f TC de ig — t a i g i h a e a icc dc a d de ig i g f a a e c b c f i f i ic i t e ba d f a i i a di f abad a icke e c. We ide if he ecific de ig si ci e f h ee ch i i ca i f i ic TC c a e a d he e ach c t a i a f f a e ia ha a i f he. Re a ab , e f hei f i ic TC, Ag₃A₂₂O₃₄, i edicled a t be a s t t e 3D c d ha a ife t a i s a 2D e ec f ga regi i h e high e ec f de t a d c d c i i .

DOI:

caieage(f a i)283()]TJ99819-1.134TD[I Ige u g5289[(,)-723.7().1(g)725.(f a)0eg h dlig gi i-e

i ecific i₁&a₁ e Ag₃A₂₂O₃₄ i t₁ he he ag a
P6₃/ c f c₁ e [19] a d Ba₃Nb₅O₁₅ i t₁ he t₁ e₁ f ag a
P4/ b f c₁ e [20]

e i e₁ a ic beha i₂. The a₁ ic a₂ e a₃ e h₄ i₅
ba ed₆ c₇ e₈ ed₉ i₁₀ ic₁₁ i₁₂ he dia₁₃ d₁₄ l₁₅ e (Fd-3.)
f₁₆ c₁₇ f₁₈ e [Fig. 3(a)] i₁₉ h DFT₂₀ e ec₂₁ f₂₂ ic₂₃ f₂₄ c₂₅ e ca c₂₆
a₂₇ i₂₈ h₂₉ i₃₀ Fig. 3(b).

The₁ . . . e₂ . . . e₃ . . . e₄ . . . e₅ . . . e₆
(ITC-2) i₇ c₈ . . . de₉ he f₁₀ . . . i₁₁ g. (i) A₁₂ a₁₃ g₁₄ e₁₅ d₁₆ e₁₇
he₁₈ h₁₉ e₂₀ e₂₁ g₂₂ f₂₃ . . . i₂₄ ib₂₅ e₂₆ i₂₇ g₂₈ h₂₉
a₃₀ d₃₁ N₃₂ e₃₃ p₃₄ b₃₅ h₃₆ b₃₇ a₃₈ d₃₉ (N₄₀ e₄₁ i₄₂ h₄₃ e₄₄ . . . b₄₅ e₄₆
e₄₇ f₄₈ e₄₉ ec₅₀ f₅₁ i₅₂ he₅₃ . . . i₅₄ i₅₅ b₅₆ e₅₇ e₅₈ i₅₉ he₆₀ d₆₁ e₆₂
affec₆₃ t₆₄ he₆₅ f₆₆ a₆₇ a₆₈ e₆₉ c₇₀ f₇₁ . . . i₇₂ b₇₃ e₇₄ i₇₅ g₇₆ h₇₇, a₇₈ d₇₉ a₈₀ z₈₁
e₈₂ d₈₃ e₈₄ ec₈₅ g₈₆. Thi₈₇ e₈₈ . . . e₈₉ he₉₀ d₉₁ N₉₂ e₉₃ p₉₄ b₉₅ h₉₆ b₉₇ a₉₈ d₉₉ (N₁₀₀ e₁₀₁ b₁₀₂ h₁₀₃ a₁₀₄ d₁₀₅ e₁₀₆ a₁₀₇ a₁₀₈ e₁₀₉ i₁₁₀ a₁₁₁ f₁₁₂ i₁₁₃
t₁₁₄ f₁₁₅ he₁₁₆ B₁₁₇ i₁₁₈ . . . i₁₁₉ z₁₂₀ e₁₂₁ [e.g., a₁₂₂ g₁₂₃ he₁₂₄ Γ-

e a a e d b a a g e e a g i d [ee, e.g., Fig. 4(a)],
 he i t a ba d i c a f a i i a c he e a g i d
 d e t affec t he f a a e c f i ib e i g h t. (ii) The
 ca s i e de i () a d di a i f he a t ia fi ed ba d
 [ee Fig. 4(a)] eed t be fficie f a . a
 f e . e c [25] ~ \sqrt{f} . (iii) The i c a f a i i f
 he e ec f (h e) f . t he a t ia fi ed ba d t he
 ba d ab e (be) t he eed t be ea a t t
 ad a e affec t f a a e c .

F i g t he f a q ed de ig f i ci e , e i ec a
 fe h d ed f a ide i ICSd [18], i g f f
 ea - c e t f e id a a e ce j j ¼ 1 (ch a Ag₃A₂₂O₃₄
 ha i g ¼ 1) i h ca s i e de i . We f eadi
 ide if ca dida e ITC-3 a e ia : Ag₃A₂₂O₃₄ a d
 Ba₃Nb₅O₁₅. The t he d a ic t abi i i de
 i t he S e e t a Ma e ia [21], Sec. I. Ba₃Nb₅O₁₅ i

f ci ai, eadi g . t he t e ia & ed
 f t d e ff ci a. a ia , ch a t he b c -
 t d t ha . f ee cae ier i h t e i ic d i g
 hi e ai i g fa & ec f edic ed i hi t d .
 A ida ce f de iba e d i g [c & e Fig. 1(a) i h
 1(b)] a c i c . e t f c t a defec a d c d h
 i if he a fac t i g ech i e c aed t c e
 e ha e hea , a d fe e i b i d i g .
 I deed, a e e ded ea ch f he e f ci a i e , i
 a a e i h ab i a d g ab i cac a i (e e -
 ified b Fig. S1 i he S. e e a Ma eia [21], hich
 i c de Ref. [32 35]) a g i h e & i e a & i f
 ch; e t i g h l e be t he a t acce & a ed di c &
 f f ci a a q ia .

This s a . f ed b he U.S. De a e t f
 E & g , Office f Scie ce, Ba icE & g Scie ce , Ma t ia
 Scie ce a d E gi e i g Di i i . d e G a t N . DE-
 FG02-13ER46959 C.U. We ha Li i g Y a d
 Gia ca T i achi f f he f di c i . Thi s
 ed; e . f ce f he Na i a E & g Re ea ch Scie tific
 C . i g Ce & , hich i . f ed b he Office f
 Scie ce f he U.S. De a e t f E & g . d e C f ac
 N . DE-AC02-05CH11231.

*C ffe di g a h .
 a e z g @c f ad ed

P re e add e :C ege f a q ia cie ce a d E gi e i g , Ji i U i & i , Cha gch 130012, Chi a.

[1] D. S. Gi e , H. H , a d D. C. Pai e ,
 (S i g Scie ce & B i e Media, Ne Y , 2010).

[2] A. V. M h & , (AVA ade i & ag G. bH & C . KG, Saab c e , 2011).

[3] K. Wa a, S. Ha a a a, a d T. Hada, E ec i ca a d tica
 & e ie f u g ed - Z O Si he J ci , J . J .
 A . Ph . 10, 1732 (1971).

[4] I. Ha b e g, A. Hj b e g, a d C.G. G a i , High
 a i t f a & e t hea f efec t f eac i e e a f a ed
 i di t i ide, A . Ph . Le u . 40, 362 (1982).

[5] H. Ka a z e, M. Ya a a, H. H d , M. K a i a, H.
 Ya agi, a d H. H , P e e ec i ca c d c i i
 f a & e t hi fi f C. A O2, Na t e(L d) 389, 939
 (1997).

[6] K. Ha a hi, S. Ma i hi, T. Ka i a, M. Hi a , a d H.
 H , Ligh i d ced c & i f a i a i g f efac
 t f ide i a & i e t e ec i c c d c i , Na t e
 (L d) 419, 462 (2002).

[7] G. V. Nai , J. Ki , a d A. B a e a, O ide a d i f ide
 a a e a i e a ic a q ia i t he t i ca s a ge, O t
 Ma e. E e 1, 1090 (2011).

[8] H. Mi g chi, T. Ka i a, S. Ma i hi, a d H. H , A
 g & a a e f a & e t c d c i e ide, Na t C . 2,
 470 (2011).

[9] A. K d , H. Ya agi, H. H , a d H. Ka a z e,
 & C 2O2: A t e c d c i e ide i h ide ba d
 ga , A . Ph . Le u . 73, 220 (1998).

[10] . Kia a d A. Z g , Orig i f C e i e ce f C -
 d c i i a d T a & ec i S O2, Ph . Re . Le u . 88,
 095501 (2002).

[11] T. R. Pa de , A. Za t a e , S. La , M. d'A e z ac, a d A.
 Z g , D i g . e a d d i g t t e i A2BO4
 i e ide , Ad . F c . Ma e . 21, 4493 (2011).

[12] G. Ha i e , A. Mig i , G. Ceder , G.-M. Rig a e e, a d X.
 G z e , Ide ificai a d de ig ; i c i e f h e
 effec i e a t e fa & e t c d c i g . ide , Na t
 C . 4, 2292 (2013).

[13] E. D. Pai , (Acade ic Pre , B , 1998).

[14] K. S. Ki , Y. Zha , H. Ja g , S. Y. Lee, J. M. Ki , K. S.
 Ki , J.-H. Ah , P. Ki , J.-Y. Ch i , a d B. H. H g, La ge-
 ca e a u g g h f g a he e fi . f & e chab e
 f a & e t e ec f de , Na t e(L d) 457, 706 (2009).

[15] T. Oh a a , J. O . b , T. S. z i , H. K i g a h a , M.
 O hi a , a d T. Hi g i, A -T efa & e t c d c i g
 ide: Nb12O29, J. Ph acChe H . 1135346824/2(81103/P ec f icf1Tj/55

[16] J. a de G e , P. S i e i , a d A. P . a , T a & e
 c d c i g i & a i e e l & , Na t Le u . 12, 3138
 (2012).

[17] X. Me g, D. Li , X. Dai, H. Pa , X. We , L. Z , a d G.
 Qi , N e abe h a d f a & e t c d c i i TiO2-TiC
 e : De ig a q ia f a g a ch, Sci. Re . 4, 7503
 (2014).

[18] I fga ic G t a S f c e Da aba e, Fachi f & a i z e -
 K a & he, Ge a , (2006).

[19] W. A. E g a d, A. J. Jac b , a d B. C. T fie d, S f c i a
 die f high - i chi e f ic & a i e di
 a d i & be a-a i a , S id S a e I ic 6, 21 (1982).

[20] B. He e , S. A. S hi e, T. Sieg t , A. T. Fi , a d J. V.
 Wa zca , S f c i e a d & e ie f & ed ced ba i .
 i bi . ide i g e g a bai ed f b a e f . e ,
 Che . Ma e . 3, 528 (1991).

[21] See S 9()0(f)]TNb12O29,

- [29] J. Ma, h₁, a d D.G. Sch₁, O ide i₁ face —a
i₁ f₁ e ec₁ ic , Scie ce **327**, 1607 (2010).
- [30] K. Lee, S. W. Ki₁, Y. T da, S. Ma₁, i hi, a d H. H₁,
Dica ci₁ i₁ ide a a -di. e₁ i₁ a e ec₁ ide i₁ h
a a i₁ ic e ec₁ a e₁, Na₁ : e (L₁ d₁) **494**, 336 (2013).
- [31] A. F₁a ce che₁ i a d A. Z₁ g₁, The i₁ e ba d- f₁ c₁ e
e b e₁ f₁ di g a a₁ ic c₁ fig ; a i₁ i₁ h₁ gi e
e ec₁ ic₁ e₁ ie , Na₁ : e (L₁ d₁) **402**, 60 (1999).
- [32] V. S₁e a₁ ic, S. La₁, X. Zha₁ g₁, a d A. Z₁ g₁,
C₁ : ec₁ i₁ g de i₁ f₁ c₁ i₁ a₁ he₁ f₁ acc₁ a₁ e₁ ; edic-
i₁ f₁ c₁ . d₁ e₁ t ha₁ ie₁ f₁ f₁ a₁ : Fi₁ led
e₁ e₁ a₁ - ha₁ e₁ ; ef₁ e₁ ce₁ e₁ gie , Ph₁ . Re₁ . B₁ **85**,
115104 (2012).
- [33] R. Ga₁ i₁ e₁, X. Zha₁ g₁, L. H₁, L. Y₁, Y. Li₁, T.O.L.
S. de₁, D. Ch₁, K.R. P₁ e₁ e₁ , a d A. Z₁ g₁,