

研究论文

In_2O_3 电子结构与光学性质的第一性原理计算

张富春*, a,b 张志勇a,c 张威虎a,b 阎军峰c 贡江妮c

(a中国科学院西安光学精密机械研究所 西安 710068)

(b延安大学物理与电子信息学院 延安 716000)

(c西北大学信息科学与技术学院 西安 710127)

收稿日期 2007-10-28 修回日期 2008-3-24 网络版发布日期 2008-8-28 接受日期 2008-5-12

摘要

采用基于密度泛函理论框架下的第一性原理平面波超软赝势方法, 计算了 In_2O_3 电子结构和光学线性响应函数, 系统研究了 In_2O_3 电子结构与光学性质的内在关系. 利用计算的能带结构和态密度分析了带间跃迁占主导地位的 In_2O_3 材料的能量损失函数、介电函数、反射图谱, 根据电荷密度差分图分析了 In_2O_3 材料的化学和电学特性. 研究表明 In_2O_3 光学透过率在可见光范围内高达85%, 可作为优异的透明导电薄膜材料. 同时, 计算结果为我们制备基于 In_2O_3 透明导电材料的设计与大规模应用提供了理论依据, 也为监测和控制这一类透明导电材料的生长过程提供了可能性.

关键词

[In₂O₃](#) [光学性质](#) [电子结构](#) [第一性原理](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

张富春 zhangfuchun72@163.com

作者个人主页:

张富春*; a; b 张志勇a; c 张威虎a; b 阎军峰c 贡江妮c

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (390KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[In₂O₃”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)