

研究论文

EuB₆的能带结构与成键及其光学常数的计算

姜骏, 卞江, 黎乐民

北京分子科学国家实验室, 稀土材料化学及应用国家重点实验室, 北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871

收稿日期 2007-1-8 修回日期 网络版发布日期 2007-11-12 接受日期

摘要 采用密度泛函方法研究了EuB₆的电子结构, 得到高精度能带结构和态密度分布信息; 分析成键情况, 从原子间轨道相互作用的角度说明EuB₆能带结构的特征及其半金属性质. 计算出EuB₆的介电函数、反射率、光电导率和能量损失函数谱等, 与实验结果一致, 表明了能带计算获得的电子结构信息的可靠性.

关键词 [EuB₆](#) [能带结构](#) [介电函数](#) [光电导率](#) [能量损失函数](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

黎乐民 lilm@pku.edu.cn

作者个人主页: 姜骏; 卞江; 黎乐民

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDE\(399KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“EuB₆”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [姜骏, 卞江, 黎乐民](#)