

光电子学与光电器件

## CdS掺Ti和Co几何结构及电子结构的密度泛函理论研究

熊志华<sup>1</sup>;钟都都<sup>2</sup>;王建敏<sup>2</sup>;刘国栋<sup>2</sup>;汪胜前<sup>2</sup>

江西科技师范学院 江西省光电子与通信重点实验室, 南昌 330013<sup>1</sup>

收稿日期 2006-11-10 修回日期 2007-1-12 网络版发布日期 2007-8-15 接受日期

**摘要** 采用基于密度泛函理论的第一性原理赝势平面波方法,对闪锌矿结构CdS和CdS:M (M=Ti, Co)几何结构、电荷分布、能带结构和电子态密度等进行了系统研究.几何结构研究对晶格参量进行了优化计算,Co和Ti原子掺入CdS后晶格常数均减小,晶格发生局部畸变.电荷密度计算表明,对于掺Co体系,近邻的S原子电荷分布变化明显,即有更多电子转移到S原子,同时次近邻Cd原子周围的电子分布也受到影响;对于Ti体系,邻近S原子电荷分布变化不明显,次近邻Cd原子周围电荷也没有重新分布.能带结构和态密度分析表明,由于Co3d和Ti3d电子的引入,CdS:Co成为铁磁半导体,而CdS:Ti为简并半导体.

**关键词** [光电子学](#) [晶体结构](#) [电子结构](#) [密度泛函理论](#) [Cd1-xMxS](#)

**分类号** [TN304.9](#)

**通讯作者** 熊志华 [xiong\\_zhихua@126.com](mailto:xiong_zhихua@126.com); [matxiong@yahoo.com.cn](mailto:matxiong@yahoo.com.cn)

### 扩展功能

#### 本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(929KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

#### 相关信息

▶ [本刊中 包含“光电子学”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [熊志华](#)
- [钟都都](#)
- [王建敏](#)
- [刘国栋](#)
- [汪胜前](#)