

光电子学与光电器件

用第一性原理研究掺钴碲化锌的电子结构和光学性质

胡小强¹;雷宇²;刘国栋²;汪胜前²;熊志华³

江西科技师范学院, 南昌 330013¹

江西科技师范学院 江西省光电子与通信重点实验室, 南昌 330013²

收稿日期 2006-11-10 修回日期 2007-1-10 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, 对 $Zn_{1-x}Co_xTe$ 基态的能量、几何结构、电子结构和光学性质等进行了系统的研究. 几何结构研究对晶格参量进行了优化计算, Co原子掺入ZnTe后晶格常量减小, 晶格发生局部畸变; 电子结构的研究表明, Co 3d电子的引入导致带隙宽度变窄; 计算了 $Zn_{1-x}Co_xTe$ 的光学性质, 给出了其吸收系数及介电函数的实部 ϵ_1 、虚部 ϵ_2 . 掺Co导致吸收峰在长波区域减弱且进一步向长波方向扩展.

关键词 [光电子学](#) [电子结构](#) [光学性质](#) [第一性原理](#) [Zn_{1-x}Co_xTe](#)

分类号 [TM283](#)

通讯作者 熊志华 xiong_zhihua@126.com; matxiong@yahoo.com.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(619KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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

- [胡小强](#)
- [雷宇](#)
- [刘国栋](#)
- [汪胜前](#)
- [熊志华](#)