

Ag, Zn 掺杂对 CdS 电子结构和光学性质的影响*

李春霞 党随虎†

(长江师范学院物理学与电子工程学院, 重庆 408003)

(2010年11月2日收到; 2011年5月5日收到修改稿)

运用密度泛函平面波赝势方法和广义梯度近似, 对替代式掺杂 Ag 和 Zn 的闪锌矿 CdS 的超晶胞晶体结构、电子结构和光学性质进行了计算, 分析了其电子态分布与结构的关系, 给出了掺杂前后 CdS 体系的介电函数和复折射率函数. 研究表明, 掺有 Ag 的 CdS 晶体空穴浓度增大, 会明显提高材料的电导率, 而 Zn 掺杂不改变 CdS 晶体载流子浓度; Ag, Zn 掺杂体系光学带隙均变窄; 通过分析掺杂前后 CdS 晶体的介电函数和复折射率函数, 解释了体系的发光机理.

关键词: 密度泛函理论, Ag, Zn 掺杂 CdS, 电子结构, 光学性质

PACS: 72.80.Ey, 71.55.Gs, 71.15.Mb

1 引言

硫化镉 (CdS) 是 II-VI 族宽禁带半导体材料, 由于具有许多优异的光学和电学性质, 其潜在的应用前景受到人们广泛的关注. 如 CdS 薄膜在传感器、太阳能电池、光探测器、激光材料、光波导器件和非线性集成光学器件等领域有着广泛的应用 [1,2]. 实际中, 半导体材料在生长过程中会产生缺陷, 由于这种缺陷是电激活的, 缺陷和载流子间存在相互作用, 使得缺陷的存在会严重影响半导体材料的电学和光学性能. 另一方面通过设计可以利用缺陷来改善半导体材料的电学和光学性能. CdS 通常有六方相纤锌矿和立方相的闪锌矿两种结构, 纤锌矿结构的 CdS 在光敏器件方面存在潜在应用, 人们对它的掺杂进行了广泛的研究 [3-7]. 对闪锌矿结构 CdS 及其取缺陷后特性的关注还不是很多 [8,9], Desnica 等 [10,11] 研究发现, 掺 Cl 等元素可以提高电导率得到电学性质较理想的 n 型 CdS 半导体材料. 同时研究了 Cu, Ag 和 Au 掺杂 CdS 晶体电子性质改变的微观机制 [11]. 我们以前研究发现在闪锌矿结构的 CdS 中 Mg, Cu 替位 Cd 掺杂均

为 CdS 的 p 型掺杂剂, 且 Cu 较 Mg 是更好的 p 型掺杂剂 [12]. S, Cd 空位可以使其光学性能的变化主要集中在低能量区, 且光学吸收边发生明显的变化 [13]; 进一步研究发现 Ag, Zn 替位 Cd 掺杂也能很好改善 CdS 电学和光学性能, 相关的第一性原理研究还未见报道.

本文用平面波赝势方法对闪锌矿结构的 CdS 晶体中掺入杂质 M ($M = \text{Ag}, \text{Zn}$) 进行超晶胞处理, 从理论上计算了两种掺杂情况下 CdS 材料的电子结构和光学性能. 分析了其电子态分布与结构的关系; 并深入研究了掺杂对体系导电性能的影响; 研究了掺杂前后 CdS 晶体的光学性质, 解释了体系的发光机理.

2 理论模型和计算方法

2.1 理论模型

闪锌矿结构的 CdS 属于 $F43_m$ 空间群, 晶格常数为 5.8304 \AA [14], 原子坐标是 Cd(0,0,0) 和 S(0.25,0.25,0.25). 本文计算模型是在 CdS 单晶胞基础上构造 $2 \times 2 \times 2$ 的超晶胞如图 1 所示, 其中

* 重庆市教委科学技术研究基金 (批准号: KJ081307, KJ091312)、长江师范学院校级项目 (批准号: 2010c2jsky021, 2010c2jsky020) 资助的课题.

† E-mail: dangsuihu@126.com

理想晶体 CdS 中 Cd—S 键长均为 2.525 Å, Cd—S 键之间的键角为 109°47′. 掺杂时原子 Ag, Zn 替换晶格上的一个 Cd 原子后得到掺杂超晶胞结构模型, 在 2 × 2 × 2 的超晶胞中, Ag, Zn 掺杂浓度均为 1/35, 百分率浓度均为 2.86%.

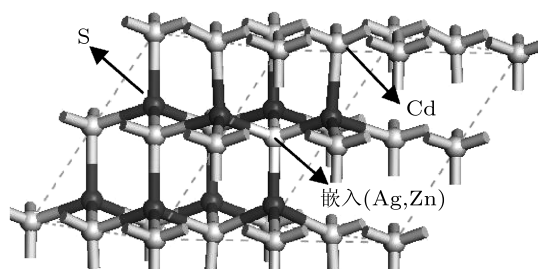


图1 CdS 超晶胞模型

2.2 计算方法

从头计算工作是由基于密度泛函理论的量子力学程序 CASTEP 完成的^[15]. 采用平面波基赝势方法, 对理想和掺杂后的 CdS 超晶胞 (2 × 2 × 2) 进行几何结构优化, 交换和相关势由广义梯度近似 (GGA-PBE) 进行描述, 是目前较为准确的电子结构计算的理论方法^[15,16]. 在晶体周期性势场中, 采用三维周期性边界条件, 将多电子体系用平面波函数展开表示. 为尽量减少平面波基个数, 采用超软赝势来描述离子实与价电子之间的相互作用, 平面波截断能 (E_{cut}) 选取为 350 eV. 布里渊区的积分计算采用 4 × 4 × 2 的 Monkhorst-Pack^[17] 特殊 K 网格点对 Brillouin 求和, 以保证体系能量和构型在准完备平面波基水平上的收敛. 在自洽场运算中, 采用了 Pulay 密度混合法, 自洽场设为每个原子 2×10^{-6} eV. 在对模型的结构优化中, 采用了 BFGS 算法, 优化参数有 4 个, 即原子间相互作用力的收敛标准设为 0.05 eV/Å; 单原子能量的收敛标准设为 2×10^{-5} eV; 晶体内应力的收敛标准设为 0.1 GPa; 原子最大位移收敛标准设为 0.002 Å, 结构优化完成的标准是四个参数达到或优于收敛标准. 计算时先优化 CdS 超晶胞结构, 在优化结构的基础上掺杂 Ag, Zn 并计算掺杂后晶体的电子结构和光学性质.

2.3 光学性质的理论描述

体系在较小波失下对光电场的线性响应由复介电常数 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ 或者用复折射率函

数 $N = n + ik$ 来描述, 其中 $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$, $\varepsilon_2 = 2nk$. 由于计算电子中无论是带间还是带内跃迁频率都远超过声子频率, 而且使用的方法是单电子近似方法, 故仅考虑电子激发, 从量子力学的观点看, 带间跃迁光吸收过程是电子在辐射电磁场微扰作用下从低能态跃迁到高能态过程. 从直接跃迁概率的定义和色散关系可推导出晶体介电常数虚部为

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{C}{\omega^2} \sum_{C,V} \int_{\text{BZ}} \frac{2}{(2\pi)^3} |M_{CV}(\mathbf{K})|^2 \times \delta(E_C^K - E_V^K - \hbar\omega) d^3K,$$

其中, 下标 C, V 分别表示导带和价带, BZ 表示第一布里渊区, \mathbf{K} 为倒格矢, $|M_{CV}(\mathbf{K})|^2$ 为动量矩阵元, C 为常数, ω 为圆周频率, E_C^K 和 E_V^K 分别为导带和价带的本征能级.

3 计算结果与讨论

3.1 Ag, Zn 掺杂 CdS 电子结构

3.1.1 晶体结构

对 CdS 晶体以及两种掺杂情况进行结构优化, 优化后的晶胞参数如表 1 所示.

表1 CdS 及 Ag, Zn 掺杂 CdS 的晶胞参数值

晶格常数	CdS	CdS:Ag	CdS:Zn
计算值/Å	4.1810	4.1140	4.1332
实验值 ^[18] /Å	4.1220	-	-
Cd—S 平均键长/Å	2.5250	2.5370	2.5523
M—S 键长/Å	-	2.4635	2.4019

从表 1 中可以看出, 体相 CdS 晶胞参数的理论计算与已有实验数据符合^[18], 在误差允许范围内. 从优化后的结果可以看出 Ag, Zn 掺杂后 CdS 晶格常量均变小, 且对于 Ag 掺杂体系晶格常量变化更加明显. 主要是由于 Ag^+ , Ag^{2+} , Zn^{2+} 的离子半径 0.13, 0.89, 0.74 Å, 均比 Cd^{2+} 的离子半径 0.97 Å 小, 在置换 Cd 原子后与 S 形成较强的离子键, 这样 Ag, Zn 与 S 形成的 Ag—S 和 Zn—S 键长较 Cd—S 键长短, 从而减小了晶格常量, 同时这些减小的键长又导致掺杂体系中的 Cd—S 键长较未掺杂体系中 Cd—S 键长更长, 如 CdS: Ag 体系中 Cd—S 平均键长为 2.5370 Å, 而 CdS 中 Cd—S 平均键长为 2.5250 Å, 导致杂质周围晶格发生局

部畸变. 如表 1 所示, 平均 $M(\text{Ag,Zn})\text{—S}$ 键长要短于 Cd—S 键长, 说明晶格中 $M(\text{Ag,Zn})\text{—S}$ 作用较强.

3.1.2 体系的态密度

图 2(a)—(c) 给出了 CdS 晶体以及两种掺杂情况的总体态密度. 由图 2(a) 可知, CdS 晶体的电子所处能级为 4 组, 即带 1、带 2、带 3 和带 4, 分别对应图 2(a) 中标注的 1, 2, 3, 4. 带 1 宽度大约为 1.80 eV , 分布有 S 原子的 $3s$ 态电子, 还有少量 Cd 原子的 $5s, 5p$ 及 $4d$ 态电子也分布在这个区域; Cd 原子的 $4d$ 态电子主要分布在约 -7.49 eV (即带 2) 处, 可看出其峰值很尖锐, 显示出较强的局域性, 与其他价带之间无明显的相互作用; 带 3 宽度大约为 4.78 eV , 这个区域分布 $\text{Cd}5s5p$ 态和 $\text{S}3p$ 态电子, 且 $\text{S}3p$ 态电子决定了价带顶的位置; 带 4 (即导带) 宽度大约为 4.23 eV , 主要分布 Cd 原子的 $5s$ 态电子, 还有少量 S 和 Cd 原子的 p 态电子也分布在这个区域. 此结果与 Desnica 等^[10,11] 所得相似. 比较图 2 可以发现三者都非常相似, 只是 Zn 掺杂的 CdS 晶体 (图 2(c)) 电子所处能级在价带部分 (约 -5.9 eV 处) 比 CdS 和 CdS:Ag (图 2(a) 和 (b)) 多了一组能

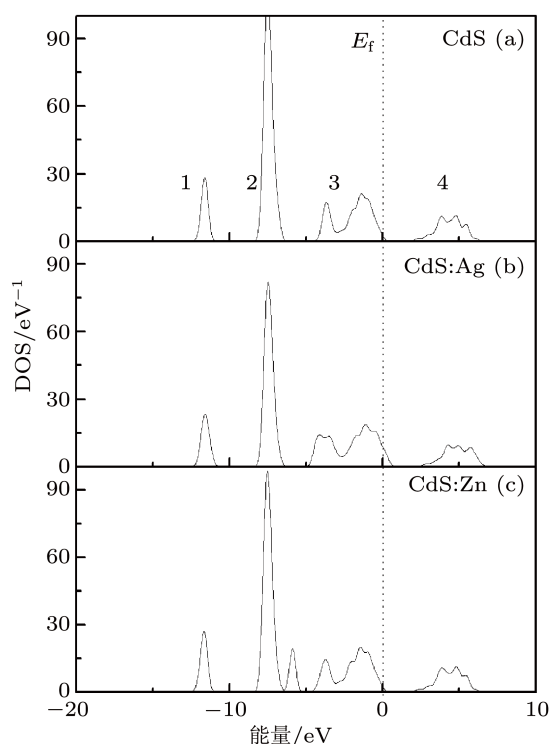


图 2 理想 CdS 以及两种掺杂情况的态密度

带, 根据分波态密度图分析这是掺杂原子 Zn 的 $3d$

态电子所处能级; 整个价带位置基本保持不变, 导带底的位置由 $\text{Cd}5s5p$ 态电子决定. 图 2(b) 电子所处能级也为 4 组, Ag 掺杂 (图 2(b)) 使 CdS 价带顶位置向高能方向移动约 0.69 eV , 导带位置向高能区移动约 0.66 eV , 导致光学带隙宽度变小. 由分波态密度图 3 和图 4 分析可知, Ag 掺杂 CdS 体系导带底的位置主要是由 $\text{Cd}5s$ 态电子决定, 价带顶仍然由 $\text{S}3p$ 态电子决定的, 且在价带顶附近存在着一定量的空穴. 由于 Ag 和 Zn 掺杂是两种不同性质的掺杂, Zn 是等价掺杂, 它不可能提供施主或受主能级; 而 Ag 是异价掺杂, Ag 掺杂提供了可接受电子的受主能级, 所以价带顶附近存在空穴.

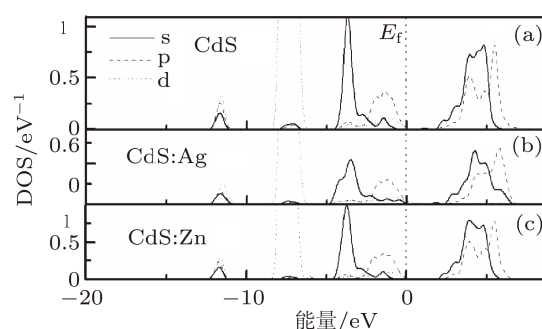


图 3 理想 CdS 晶体以及两种掺杂情况 Cd 原子的态密度

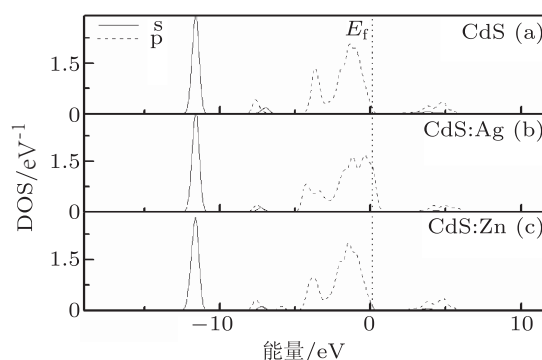


图 4 理想 CdS 晶体以及两种掺杂情况 S 原子的态密度

为了定量分析态密度, 对费米能级以上, 价带以下的态密度进行了积分, 得到的积分密度为 CdS 为 144, CdS:Ag 为 131, CdS:Zn 为 144. 这些数值分别代表了各体系中外层电子可填充能级的电子态数目. 计算时各元素的亚电子层分别是 S 的 $3s^23p^4$ 层, Cd 的 $4d^{10}5s^2$ 层, Ag 的 $4d^{10}5s^1$ 层, Zn 的 $3d^{10}4s^2$ 层, 这样各元素对电子结构的贡献就分别考虑了 6, 12, 11, 12 个外层电子. 因此每个体系的超晶胞结构单元中含有的价电子总数分别为 Cd_8S_8 包含 144 个, AgCd_7S_8 包含 143 个,

ZnCd₇S₈ 包含 144 个. 比较可填充能级电子态数目和价电子的数目, 我们知道 Cd₈S₈ 和 ZnCd₇S₈ 价带处于满填充状态, 费米面恰好位于价带顶, 而 AgCd₇S₈ 的可填充能级电子态数目比价电子数目少 12 个, 即价带的填充情况是不满的, 有电子的空穴态出现, 费米面降低到价带中. 根据半导体的导电机理^[19], CdS:Ag 这种能带结构的掺杂体系的电导率和发光性能可以大大提高. 从电荷守恒的角度分析, 在掺杂前后电荷是守恒的, 即 $2\text{Cd}^{2+} \rightarrow \text{Ag}^{1+} + \text{Cd}^{3+}$, 这样 Cd³⁺ 的空穴密度增加. 结果表明, Ag 掺杂会增大 CdS 晶体空穴浓度, 能够明显提高材料的电导率, 而 Zn 掺杂对载流子浓度基本没有影响.

3.2 Ag, Zn 掺杂 CdS 光学性质

3.2.1 CdS 晶体及两种掺杂情况的光学带隙

我们计算的 CdS 晶体的光学带隙 (1.16 eV) 与其它理论结果 (1.07 eV)^[20] 基本符合, 但与实验值 (2.42 eV)^[21] 相差较大, 主要是由于 GGA 近似和局域密度近似 (LDA) 都存在光学带隙值偏低的普遍问题^[22,23]. 但其相对值的比较还是非常准确的, 因此并不影响对 CdS 及掺杂体系的理论分析. 比较本文计算结果可以发现, Ag, Zn 掺杂后 CdS 晶体的光学带隙分别变窄为 1.02 和 0.96 eV (如图 5 所示). 原因是高浓度掺杂产生的自由载流子, 从以下两个方面改变了 CdS 材料的带隙. 一方面高浓度的载流子使费米能级移入导带而产生所谓的 Burstein-Moss (简记为 B-M) 移动, 使光学吸收边向低能方向移动而使带隙变宽^[24]; 二是电荷之间相互作用产生多体效应或杂质缺陷带之间的重叠使带隙变窄. 但是在高掺杂 Ag, Zn 原子浓度的条件下, 前者的作用小于后者, 总的效果是光学带隙随杂质原子的掺入变小, 即

$$E_g = E_{go} + \Delta E_g^{BM} - \Delta E_g^W$$

式中 E_{go} 为未掺杂理想条件下的带隙, ΔE_g^{BM} 为 B-M 移动, ΔE_g^W 为根据 Woff 理论得到的电子多体效应引起的导带下移. 在高掺杂 Ag, Zn 原子浓度条件下, $\Delta E_g^{BM} < \Delta E_g^W$, 所以禁带变窄. 可见, Ag, Zn 掺

杂后带隙的变化规律与以上理论相符.

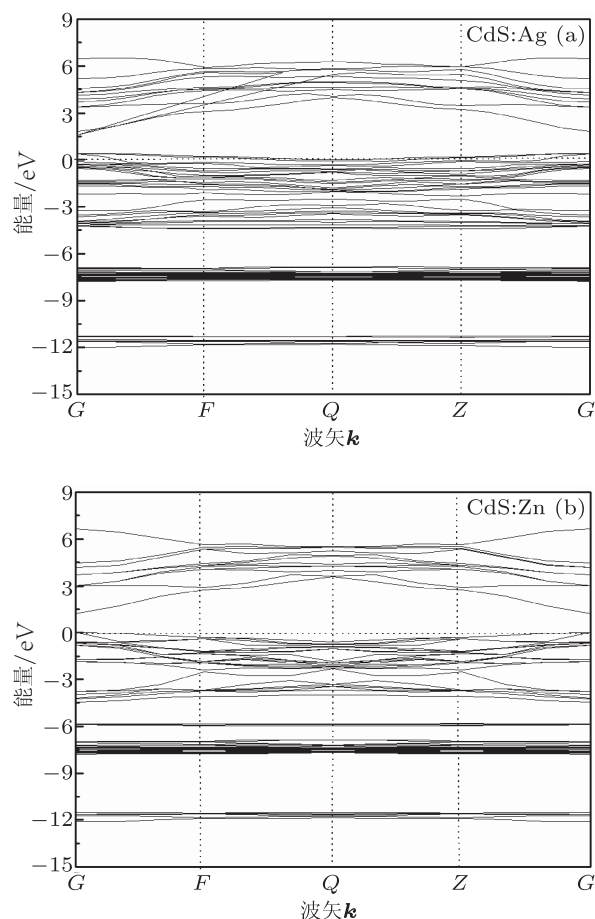


图 5 Ag 掺杂 CdS (a) 和 Zn 掺杂 CdS (b) 的能带结构图

3.2.2 CdS 晶体及两种掺杂情况的复介电函数虚部

介电函数作为沟通带间跃迁微观物理过程与固体电子结构的桥梁, 反映了固体能带结构及其各种光谱信息. CdS 及其掺杂 Ag, Zn 缺陷体系均为直接带隙半导体, 其光谱是由能级间电子跃迁所产生的, 各个介电峰可以通过能带结构和态密度来解释.

图 6 给出了 CdS 及其掺杂体系的介电函数虚部. 从图 6(a) 中可以看到 CdS 晶体的介电函数虚部对应的主要有 D_1, D_2, D_3 共 3 个峰, 它们对应的光子能量分别为 1.09, 5.86 和 11.51 eV, 与 Huang 等^[25] 的计算结果相符合. 根据态密度分析 (见图 2—4), 在 $D_1 = 1.09$ eV 处对应于直接跃迁阈, 与价带顶到导带底跃迁有关, 但其峰值较小, 可能是由于导带底附近被能级占据的每单位能量间隔所对应的 K 空间体积不大而引起的, 发生跃迁的主

要源于 S 3p 轨道电子; 在 $D_2 = 5.86$ eV 处对应着一个介电峰, 跃迁的电子可能是带 3 的 S 3p 轨道电子和带 4 的 Cd 5s 或带 2 的 Cd 4d 轨道电子, 也可能是带 1 的 S 3s 和带 3 的 Cd 5p 轨道电子之间的跃迁; 在 $D_3 = 11.51$ eV 处出现微弱的峰, 对应着带 1 和带 4 之间的跃迁, 跃迁的电子主要来源于带 1 的 S 3s 态电子, 由于处于带 1 的电子直接跃迁到带 4 的数目很少, 大多数是先跃迁带 2 或带 3, 再由带 2 或带 3 跃迁到带 4, 所以对应的峰值较小. 图 6(c) 与图 6(a) 的形态基本相同, 峰值位置基本保持不变, 只是峰值大小有所改变, 主要是由于掺入 Zn 杂质后引起的. Ag 掺杂 CdS (见图 6(b)), 在约 0.53 eV 处有个尖峰是由上价带内部的电子跃迁引起的, 原来的 D_1 峰消失了. 这是因为在 CdS 晶体中 D_1 峰对应的是 S 3p 电子向导带底的直接跃迁, 当掺入 Ag 后, 在导带底出现载流子, 费米能级降到价带中, 由于价带顶是空着的, 未参与跃迁过程, 所以价带顶没有电子跃迁到导带底, 导致 D_1 峰几乎消失. 其他峰值位置基本与理想 CdS 相同, 且峰值略有减少.

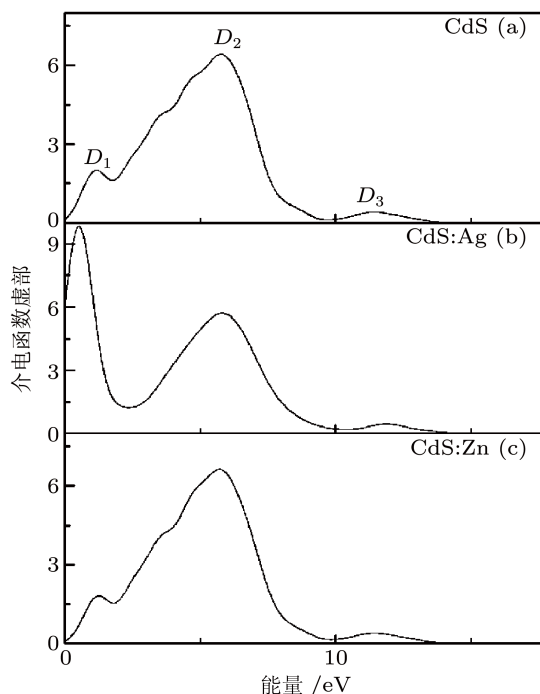


图 6 介电函数 (a) CdS; (b) CdS:Ag; (c) CdS:Zn

3.2.3 CdS 晶体及两种掺杂情况的复折射率函数

图 7(a)—(c) 为计算理想 CdS 及其 Ag, Zn 掺杂

体系的复折射率函数. 从 7(a) 可知 $n_0 = 2.618$, 与实验值 2.431^[26,27] 符合的较好, 在低能区 (光子能量小于 5.8 eV), 实部为常数, 虚部呈上升趋势; 在 高能区 (光子能量大于 14.1 eV) 虚部的值接近 0, 实部的值变化较小, 表明 CdS 体系对高频率的电磁波吸收较弱, 且在高频区其折射率几乎为常数; 比较图 7(b) 和 (c), 图形变化趋势基本一致, 但图 7(c) 的各峰值稍微向高能方向偏移, 主要是由于能带的偏移引起的. 图 7(b) 表明 Ag 掺杂 CdS 在 高能区 (光子能量大于 10.3 eV) 变化趋势与理想 CdS 晶体 (图 7(a)) 基本相同, 但在低能区实部和虚部都有所不同, 主要是由于掺入 Ag 杂质后, 电磁波通过的介质不同, 引起折射率的变化.

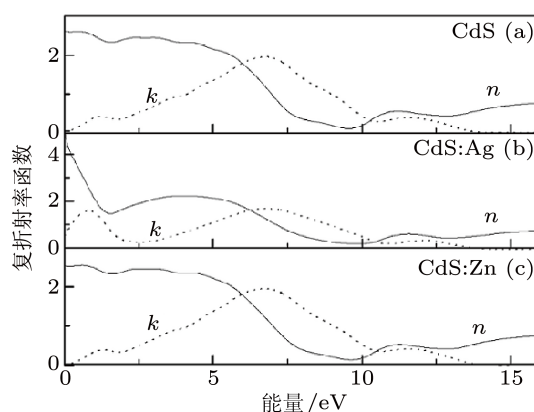


图 7 复折射率函数 (a) CdS; (b) CdS:Ag; (c) CdS:Zn

4 结论

采用基于密度泛函理论的平面波赝势方法和广义梯度近似, 对 CdS 以及 Ag, Zn 掺杂的 CdS 超晶胞进行结构优化, 计算了它们的电子结构和光学性质. 研究表明: 掺有 Ag 的 CdS 晶体的空穴浓度增大, 明显提高了材料的电导率, 改善了 CdS 晶体的电学性能, Zn 掺杂不改变 CdS 晶体的载流子浓度; 分析了掺杂前后 CdS 晶体的介电函数和复折射率函数, 并解释了体系的发光机理. 计算结果与现有理论相符合, 为 CdS 材料在分子原子尺度上进一步设计与应用提供了理论依据.

感谢太原理工大学和山西大学对本文提供的计算支撑.

- [1] Shen J, Ma G H, Zhang Z J, Hua Z Y, Tang S H 2005 *Acta Opt. Sin.* **25** 8 (in Chinese) [沈杰, 马国宏, 章状健, 华中一, 唐星海 2005 光学学报 **25** 8]
- [2] Sahay P P, Nath R K, Tewari S 2007 *Cryst. Res. Technol.* **42** 275
- [3] Rohlfing M, Krüger P, Pollmann J 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3489
- [4] Chang K J, Froyen S, Cohen M L 1983 *Phys. Rev. B* **28** 4736
- [5] Vogel D, Kruger P, Pollmann J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 5495
- [6] Lew Y V L C, Willatzen M, Cardona M, Christensen N E 1996 *Phys. Rev. B* **53** 10703
- [7] Kazume N, Takuya S, Yuta M, Mamoru B, Masayuki H 2006 *Phys. Rev. B* **74** 035210
- [8] Xu R H, Wang Y X, Jia G Q, Xu W B, Yin D Z 2007 *Chem. J. Chin. Univ.* **2** 217 (in Chinese) [许荣辉, 汪勇先, 贾广强, 徐万帮, 尹端泚 2007 高等学校化学学报 **2** 217]
- [9] Xiong Z H, Rao J P, Jiang F Y 2007 *Acta Opt. Sin.* **27** 12 (in Chinese) [熊志华, 饶建平, 江风益 2007 光学学报 **27** 12]
- [10] Desnica-Franković I D, Desnica U V, Stötzler A, Deicher M 1999 *Physica B* **273** 887
- [11] Desnica U V, Desnica-Franković I D, Magerle R, Deicher M 1999 *Physica B* **273** 907
- [12] Dang S H, Li C X, Han P D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4137 (in Chinese) [党随虎, 李春霞, 韩培德 2009 物理学报 **58** 4137]
- [13] Li C X, Dang S H, Han P D 2010 *Acta Opt. Sin.* **30** 5 (in Chinese) [李春霞, 党随虎, 韩培德 2010 光学学报 **30** 5]
- [14] Rodic D, Spasojevic V, Bajorek A, Oennerud P 1996 *J. Magn. Mater.* **152** 159
- [15] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J, Pickard C J, Hasnip P J, Clark S J, Payne M C 2002 *J. Phys. Cond. Matt.* **14** 2717
- [16] Yamamoto T, Katayama-Yoshida H 2001 *Physica B* **302** 155
- [17] Hendrik J, Monkhorst, James D Pack 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [18] Rodic D, Spasojevic V, Bajorek A, Oennerud P 1996 *J. Magn. Mater.* **152** 159
- [19] Lu D, Jiang P, Xu Z Z 2003 *Solid-State Physics* (Shanghai: Shanghai Publishing House of Science and Technology) pp172–186 (in Chinese) [陆栋, 蒋平, 徐至中 2003 固体物理学 (上海: 上海科学技术出版社) 第 172—186 页]
- [20] Deligoz E, Colakoglu K, Ciftci Y 2005 *Physica B* **373** 124
- [21] Pardo-Yissar V, Katz E, Wasserman J, Willner I 2003 *J. Am. Chem. Soc.* **125** 622
- [22] Wu Y X, Hu Z X, Gu S L, Qu L C, Li T, Zhang H 2010 *Acta Phys. Sin.* **60** 017101 (in Chinese) [吴玉喜, 胡智向, 顾书林, 渠立成, 李腾, 张昊 2011 物理学报 **60** 017101]
- [23] Gu M, Lin L, Liu B 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2836 (in Chinese) [顾牡, 林玲, 刘波 2010 物理学报 **59** 2836]
- [24] Burstein E 1954 *Phys. Rev.* **93** 632
- [25] Huang M Z, Ching W Y 1993 *Phys. Rev. B* **47** 9449
- [26] Teaching and Research Office of Institute of Geology Crystal Minerals in Beijing, 1996 *Mineralogy* (Beijing: China Industry Press) p25 (in Chinese) [北京地质学院结晶矿物教研室 1966 矿物学 (北京: 中国工业出版社) 第 25 页]
- [27] Wills A S 2001 *Can. J. Phys.* **79** 1501

Doped with Ag and Zn effects on electronic structure and optical properties of CdS*

Li Chun-Xia Dang Sui-Hu[†]

(College of Physics and Electronic Engineering, Yangtze Normal University, Chongqing 408003, China)

(Received 2 November 2010; revised manuscript received 5 May 2011)

Abstract

The geometry structure, electronic structure and optical properties of zinc bende CdS: M ($M = \text{Ag}, \text{Zn}$) were studied systemically using density functional theory based on first-principles ultrasoft pseudopotential method and GGA. The relationship between the distribution of the electronic states and their structures has been analyzed. The dielectric function and the complex refractive index function on doping CdS system have been obtained. The calculation results showed that the hole concentration of Ag-doped CdS is increased, enhanced the conductivity of the material. But the carrier concentration of Al-doped CdS was not changed; the optical band gap were narrowed for Ag-doping, Zn-doping CdS. The mechanism of luminescence has been explained in terms of an analysis of the dielectric function and the complex refractive index function.

Keywords: density functional theory, Ag and Zn doping CdS, electronic structure, optical properties

PACS: 72.80.Ey, 71.55.Gs, 71.15.Mb

* Project supported by the Science and Technology Research Foundation of Chongqing Municipal Education Commission, China (Grant Nos. KJ081307, KJ091312), and the Research Fund of the College of Physics and Electronic Engineering, Yangtze Normal University, China (Grant Nos. 2010c2jsky021, 2010c2jsky020).

[†] E-mail: dangsuihu@126.com