

稀土元素掺杂含单碲空位缺陷单层 WTe_2 光学性质的第一性原理*

尹开慧¹⁾ 朱洪强^{1)†} 徐凤霞¹⁾ 吴泽邦¹⁾ 高田军¹⁾
杨英¹⁾ 冯庆¹⁾ 岳远霞¹⁾ 贾伟尧^{2)‡}

1) (重庆师范大学物理与电子工程学院, 重庆 401331)

2) (西南大学物理科学与技术学院, 重庆 400715)

(2025年9月2日收到; 2025年10月1日收到修改稿)

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波超软赝势方法, 计算了本征单层二碲化钨 (WTe_2)、单碲空位缺陷 (V_{Te}) 单层 WTe_2 及稀土元素 X ($X = \text{Ce}, \text{Yb}, \text{Eu}$) 掺杂含 V_{Te} 的单层 WTe_2 ($V_{\text{Te}}\text{-}X$) 的能带结构、电子态密度及光学性质, 以探究稀土掺杂与单碲空位缺陷的共同作用对单层 WTe_2 光学性质的提升效果. 相较于 V_{Te} 缺陷类型, $V_{\text{Te}}\text{-}X$ 缺陷类型对单层 WTe_2 材料在红外波段 (0—1.2 eV) 的光学性能提升更佳. 所有 $V_{\text{Te}}\text{-}X$ 缺陷类型均表现出金属性, 费米能级附近的电子态密度峰值显著增强. 其中 $V_{\text{Te}}\text{-Yb}$ 缺陷类型在红外范围内的吸收系数、反射率、静介电常数和介电函数虚部峰值较单层 WTe_2 分别提升了 3.76 倍、1.83 倍、2.63 倍和 24.20 倍. 该研究为基于单层 WTe_2 衬底的红外光传感器设计提供了理论依据.

关键词: 单层 WTe_2 , 第一性原理, 光学性质

PACS: 31.15.A-, 61.50.Ah, 61.72.jd

DOI: 10.7498/aps.74.20251196

CSTR: 32037.14.aps.74.20251196

1 引言

二碲化钨 (WTe_2) 作为过渡金属硫族化合物 (TMDCs) 的一员, 其具有 TMDCs 典型的光电转换性能和高机械柔韧性等物理性质^[1-4]. WTe_2 是一种典型的二维层状材料, 面内通过强共价键形成 Te-W-Te 三明治结构, 层间则通过弱范德瓦耳斯力堆叠, 这种特殊结构使其可通过机械剥离制备成单层 (1 L) 至多层 (<5 L) 的二维纳米材料^[5]. 块体 WTe_2 呈半金属性 (带隙约 0.1 eV), 而单层 WTe_2 为直接带隙半导体 (带隙 1—1.1 eV), 并因其强自旋轨道耦合表现出独特的量子输运行为和潜在拓

扑性质^[6,7]. 然而, 其有限的带隙值限制了其在红外 (尤其波长 >1.24 μm , 光子能量 <1 eV) 光电器件中的应用效率.

为突破红外光电应用限制, 当前提升二维材料光学性能的方法主要包括空位缺陷、构建异质结和化学掺杂等^[8-10]. Schuler 等^[11,12] 研究表明, 单层 TMDCs 制备过程中产生的空位缺陷可在禁带引入浅能级缺陷态, 显著降低带隙值并增强电子跃迁概率. Wu 等^[13] 通过对 WS_2/Ge 异质结进行缺陷工程和界面钝化, 实现了从深紫外到中红外波段的宽谱响应提升. 然而本征二维材料的发光光子能量多局限于可见光至近红外波段 (0.4—1.2 eV), 限制了其在红外发光领域的应用^[14]. 稀土元素因

* 重庆市自然科学基金 (批准号: CSTB2023NSCQ-MSX0207, CSTB2023NSCQ-MSX0425) 和重庆市教委科学技术研究计划 (批准号: KJQN202200569, KJQN202200507, KJQN202300513, KJZD-K202300516) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: 20132013@cqnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: wyjia@swu.edu.cn

其未满 4f 电子壳层可产生特征红外跃迁, 为拓展发光光谱提供了新途径^[15]. Xu 等^[16]在二维二硫化钨中嵌入钨元素实现了发光峰的红移, 验证了该方法的可行性. 考虑到空位缺陷已被证明可有效调控 TMDCs 的带隙^[17], 将稀土掺杂与空位缺陷相结合, 有望共同调控单层 WTe_2 的红外光学性质: 空位缺陷降低有效带隙并可能增大激子浓度, 而稀土元素则可提供特定的红外跃迁通道, 从而共同提升其在红外波段 (0—1.2 eV) 的光学响应. 基于此, 本文研究了稀土元素掺杂结合单碲空位缺陷对单层 WTe_2 的改性作用. 通过第一性原理系统分析了该方法对单层 WTe_2 能带结构、态密度及红外光学性质 (吸收、反射、介电函数等) 的影响, 为设计基于单层 WTe_2 的高性能红外光电器件提供理论依据.

2 模型构建及计算方法

计算采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 利用 Materials Studio 软件中的 CASTEP (Cambridge Sequential Total Energy Package) 模块进行^[18]. 考虑到色散相互作用、长程电子关联效应等影响, 所有计算采用密度泛函理论与广义梯度近似 GGA (general gradient approximation) 下的 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 交换关联泛函进行几何结构优化, 使计算结果更准确^[19]. 虽然使用 PBE 泛函会低估材料的带隙值, 在本文中得到的带隙值与参考文献^[23]中的带隙值只相差 3.6%, 在误差范围 (<5%) 内, 因此对本文最终得到的结论影响不大. 电子与离子实之间的相互作用通过平面波超软赝势近似进行描述, 同时采用自洽场方法求解 Kohn-Sham 方程和能量泛函^[20,21]. 计算参数设置如下: 构建了 $3 \times 3 \times 1$ 超晶胞模型, 为了避免

层间相互作用, 真空层厚度设置为 1.5 nm. 平面波截断能设置为 400 eV, 布里渊区 K 点网格设置为 $9 \times 9 \times 1$, 原子力收敛精度设置为 1×10^{-3} eV/nm, 能量自洽精度收敛为 5×10^{-7} eV/atom, 原子间最大应力 < 0.02 GPa^[22].

3 结果讨论

计算结果表明, 稀土元素替代 W 位点的模型性能优于 Te 位点模型, 因此本文仅展示单碲空位缺陷结合稀土元素取代 W 原子位点模型的相关数据.

图 1(a) 为本征单层 WTe_2 结构示意图, 其中 Te 为空位缺陷位点, 掺杂位点为 W 位点. 图 1(b) 为本征单层 WTe_2 的能带结构图和分态密度图. 能带结构表明价带顶与导带底均位于布里渊区 G 点, 证实本征单层 WTe_2 为直接带隙半导体, 带隙值为 1.06 eV, 与文献^[23]报道相一致. 本征单层 WTe_2 的分态密度与其能带结构相符, 价带顶与导带底之间的能隙与该材料的带隙值一致.

根据原子的对称性考虑了四种缺陷类型: 单碲空位缺陷 (V_{Te})、单碲空位缺陷结合稀土元素 Ce, Yb, Eu 取代 W 原子位点: $V_{\text{Te}}\text{-Ce(W)}$, $V_{\text{Te}}\text{-Yb(W)}$, $V_{\text{Te}}\text{-Eu(W)}$, 其原子结构俯视图和侧视图如图 2(a)—(d) 所示.

3.1 声子谱

声子谱反映了材料中晶格振动模式的频率与动量关系, 可直接表征原子间相互作用、对称性及稳定性^[24,25]. 图 3 为 $V_{\text{Te}}\text{-Yb(W)}$ 模型的声子谱, 可见该模型的声学支格波和光学支格波均无虚频, 验证了其结构稳定性.

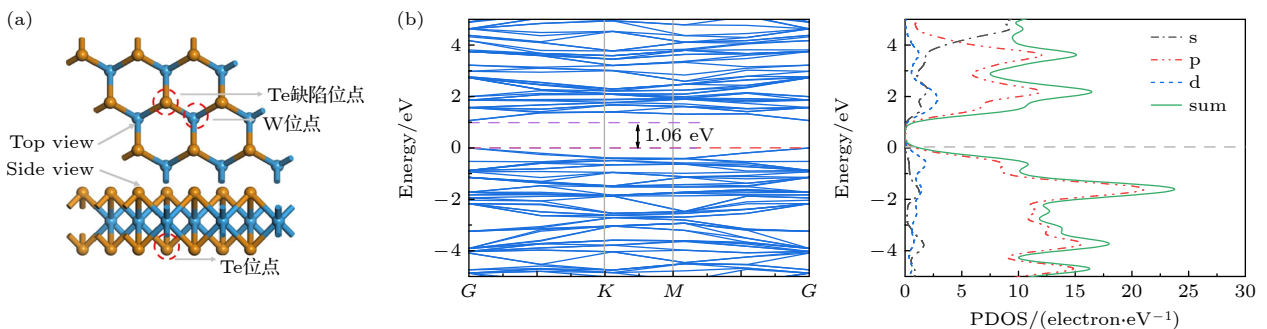


图 1 (a) 单层 WTe_2 原子结构俯视图和侧视图; (b) 单层 WTe_2 能带结构图、态密度图

Fig. 1. (a) Top and side views of monolayer WTe_2 ; (b) band structure and partial density of states of monolayer WTe_2 .

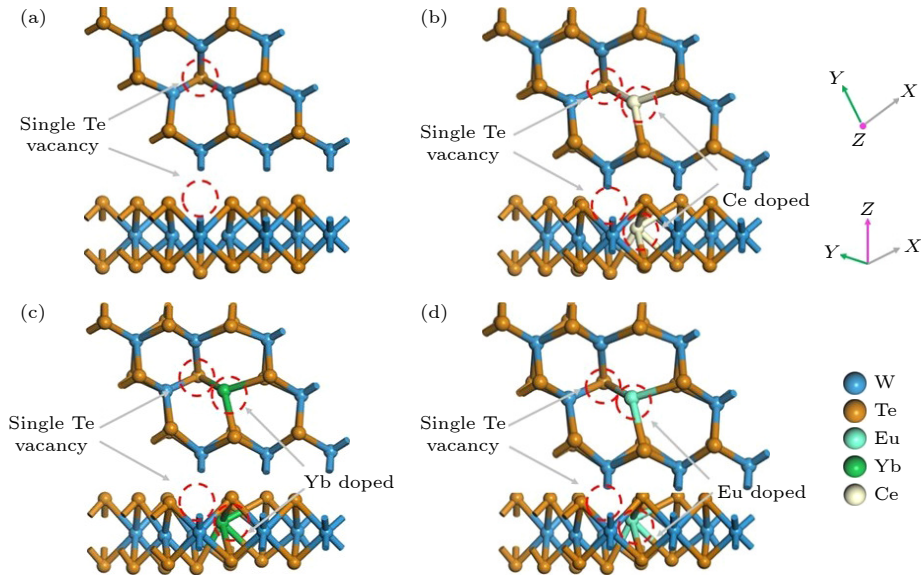

 图 2 不同缺陷类型的单层 WTe_2 原子结构俯视图和侧视图 (a) V_{Te} ; (b) $V_{\text{Te}}\text{-Ce(W)}$; (c) $V_{\text{Te}}\text{-Yb(W)}$; (d) $V_{\text{Te}}\text{-Eu(W)}$

Fig. 2. Top and side views of atomic structures for monolayer WTe_2 with different defect types: (a) V_{Te} ; (b) $V_{\text{Te}}\text{-Ce(W)}$; (c) $V_{\text{Te}}\text{-Yb(W)}$; (d) $V_{\text{Te}}\text{-Eu(W)}$.

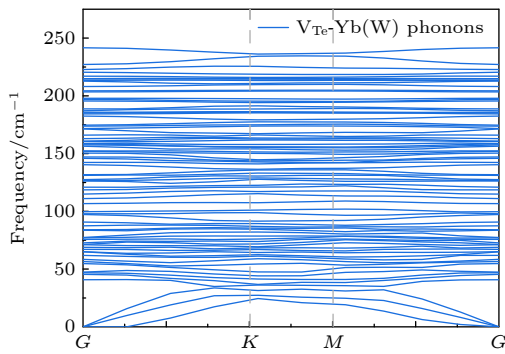

 图 3 含 $V_{\text{Te}}\text{-Yb(W)}$ 缺陷的单层 WTe_2 声子谱

Fig. 3. Phonon spectrum of the $V_{\text{Te}}\text{-Yb(W)}$ monolayer WTe_2 .

3.2 能带结构、态密度

为探究空位缺陷及稀土掺杂对单层 WTe_2 能带结构的影响, 计算了 4 种缺陷类型的能带结构和态密度, 如图 4 所示. 与本征单层 WTe_2 相比, V_{Te} 缺陷类型的带隙减小, 但仍为直接带隙半导体. 图 4(b)–(d) 显示, 在单碲空位缺陷基础上进行稀土元素掺杂后, 含 $V_{\text{Te}}\text{-Ce}$, $V_{\text{Te}}\text{-Yb}$ 缺陷类型的单层 WTe_2 表现为非磁性金属导体, 而含 $V_{\text{Te}}\text{-Eu}$ 缺陷样品表现为磁性金属导体. 稀土元素的引入在价带和导带处生成更多能带. 这些能带穿过费米能级, 导致材料呈现金属性. 这些能带有助于增强光吸收和光发射过程, 从而提升特定波长范围内的光学响应, 减小材料的禁带宽度.

空位缺陷有助于提高激子浓度, 并可能诱导形

成局域态激子. 这些局域态激子的能级通常低于带电激子和双激子能级, 并表现出多个分立能级特征, 对材料的光学性质具有重要影响, 甚至能优化材料的光学性能. 与 V_{Te} 缺陷相比, 3 种稀土掺杂样品在费米能级附近的峰值显著增强, 且价带顶与导带底的距离进一步缩短. 此外, 空位缺陷结合掺杂模型的费米能级附近观察到新的态密度峰, 这些态密度新峰可作为电子-空穴的复合中心, 为增强单层 WTe_2 的光电性能提供新的可能. 稀土元素的引入对材料的价带或导带均有不同程度的贡献. 综合能带结构和态密度分析表明, 单碲空位缺陷结合稀土元素掺杂是一种有效调控单层 WTe_2 电子结构和光学性质的改性方法.

3.3 介电函数、吸收谱和反射谱

为了验证空位缺陷结合掺杂对材料光学性质的增强效应, 计算了本征单层 WTe_2 , V_{Te} 缺陷及 3 种掺杂缺陷样品的吸收光谱、反射光谱及介电函数. 介电函数是描述材料光子吸收与再发射行为的重要物理量, 能够表征电子跃迁的动态过程, 其复数形式表示为 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$, 其中 ω 为角频率. 具体而言, 介电函数的实部 ε_1 与折射率 n 及消光系数 k 相关联, 表示为 $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$; 而虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 则反映了占据态与非占据态之间的动量矩阵元信息, 其计算公式为 $\varepsilon_2 = 2nk$ [26]. 值得注意的是, 实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 可通过 Kramers-Kronig 色散关系由虚部

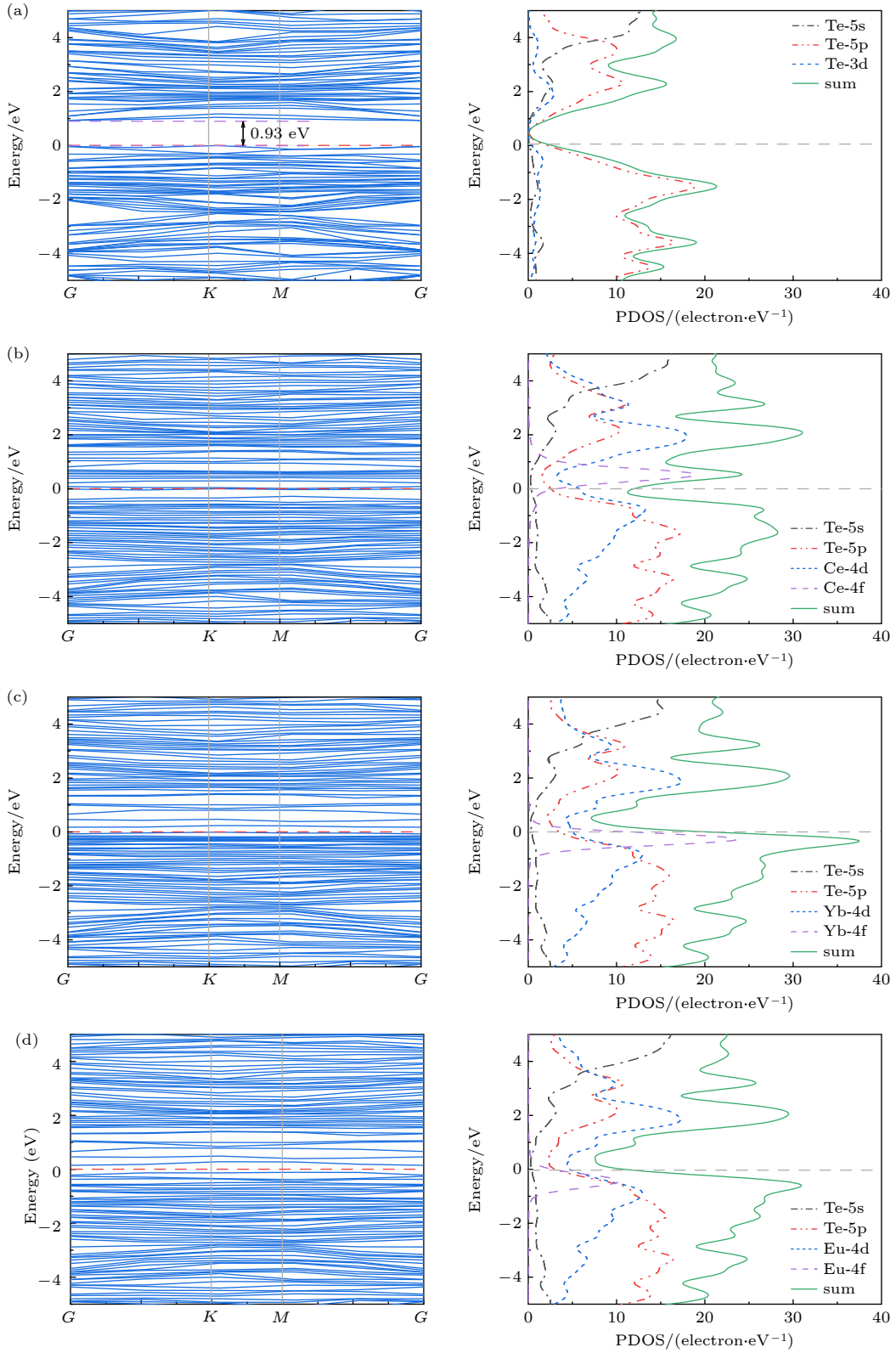

 图 4 不同缺陷类型的单层 WTe_2 能带结构图、态密度图 (a) V_{Te} ; (b) $\text{V}_{\text{Te-Ce(W)}}$; (c) $\text{V}_{\text{Te-Yb(W)}}$; (d) $\text{V}_{\text{Te-Eu(W)}}$

Fig. 4. Band structures and density of states for monolayer WTe_2 with different defect types: (a) V_{Te} ; (b) $\text{V}_{\text{Te-Ce(W)}}$; (c) $\text{V}_{\text{Te-Yb(W)}}$; (d) $\text{V}_{\text{Te-Eu(W)}}$.

$\varepsilon_2(\omega)$ 推导得出, 还能进一步推导出材料的吸收系数和反射率. 介电函数的完整表达式概述如下^[27]:

$$I(\omega) = \sqrt{2}\omega \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2}, \quad (1)$$

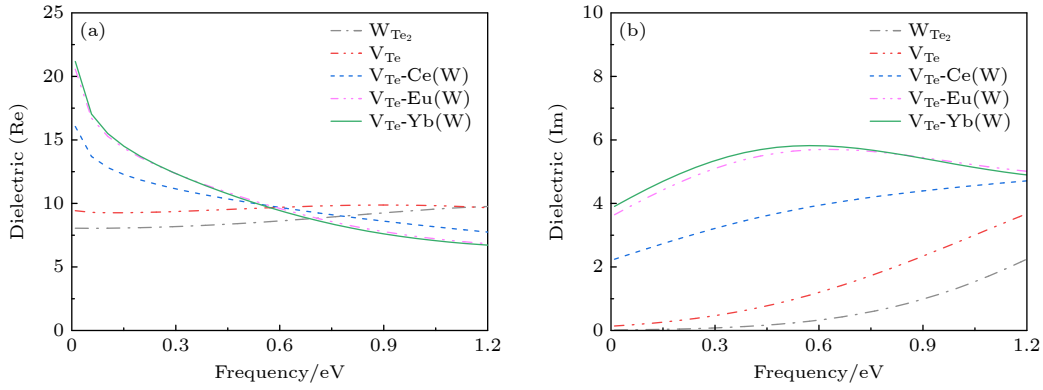

 图 5 含不同缺陷类型的单层 WTe_2 介电函数 (a) 实部图像; (b) 虚部图像

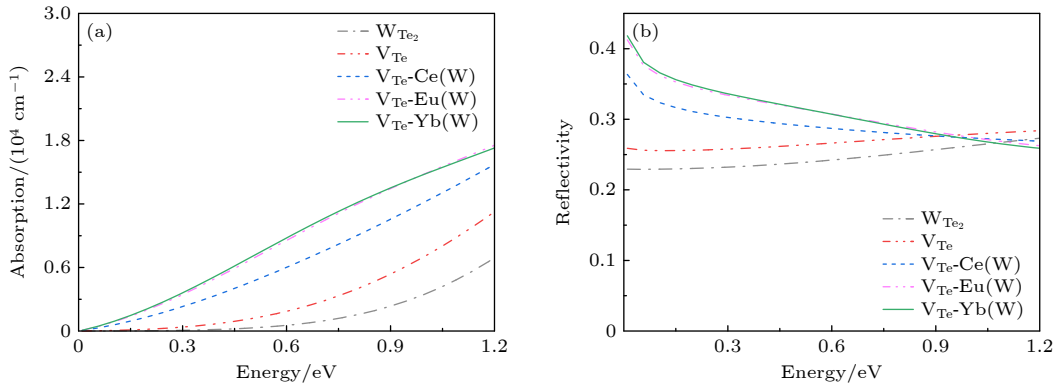
 Fig. 5. Dielectric function of monolayer WTe_2 with different defect types: (a) Real part; (b) imaginary part.

 图 6 不同缺陷类型单层 WTe_2 的 (a) 光吸收谱和 (b) 反射谱

 Fig. 6. (a) Optical absorption spectra and (b) reflectance spectra for monolayer WTe_2 with different defect types.

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)} + 1} \right|. \quad (2)$$

图 5 为本征单层 WTe_2 及 4 种缺陷类型样品的介电函数实部及虚部图. 在红外光区 (0—1.2 eV), 较本征模型, 4 种不同缺陷类型样品的介电函数实部、虚部值在该波段范围内发生明显提升. 光子能量为 0 eV 处介电函数的实部值为静介电常数, 静介电常数越高, 表明材料的极化程度越强. 本征样品的静介电常数为 8.05, $\text{V}_{\text{Te}}\text{-Yb(W)}$ 缺陷样品的静介电常数提升至 21.18, 为本征单层 WTe_2 的 2.63 倍. 在 0.53 eV 处, $\text{V}_{\text{Te}}\text{-Yb(W)}$ 缺陷样品的介电函数虚部值提升最佳, 为本征模型的 24.20 倍. 材料介电函数虚部与材料的光学性质相关联, 介电函数虚部值的显著增强直接反映了材料光学性质的改善.

为了定量评估材料的光响应能力, 我们选取吸收系数和反射率作为评估指标. 这两个参数直接反映了基态电子在光子激发下跃迁至激发态, 以及随后释放能量回归基态的电子数量的多少, 是衡量材

料光学响应性能的重要指标. 图 6(a), (b) 分别展示了本征单层 WTe_2 及 4 种缺陷类型样品的吸收光谱和反射光谱. 在红外到近紫外光谱范围内, V_{Te} 缺陷对可见光的吸收系数和反射率优于其他 3 种缺陷, 但对于红外光的吸收系数和反射率, 3 种单碲空位缺陷结合稀土元素单掺模型的数值均有提升. 其中本征样品在 1.04 eV 处的吸收系数为 $4.1 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$, 含 $\text{V}_{\text{Te}}\text{-Yb(W)}$ 缺陷样品在该处的吸收系数为 $1.54 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$, 较本征样品提升了 3.76 倍; 在光子能量为 0 eV 处, 本征样品的反射率为 0.23, 含 $\text{V}_{\text{Te}}\text{-Yb(W)}$ 缺陷样品在该能量处的反射率变化为 0.42, 改善为本征样品的 1.83 倍. 这一显著提升可归因于 Yb 掺杂结合单碲空位缺陷诱导的激子浓度增大, 致使材料光吸收和光发射能力的增强.

4 结 论

采用基于密度泛函理论体系下的第一性原理

平面波超软赝势方法, 研究了稀土元素掺杂单碲空位缺陷单层 WTe_2 的光学特性.

1) 在 $\text{V}_{\text{Te}}\text{-X}$ ($X = \text{Ce}, \text{Yb}, \text{Eu}$) 缺陷类型中, 材料由半导体转变为金属, 费米能级附近出现新的态密度峰;

2) $\text{V}_{\text{Te}}\text{-Yb(W)}$ 缺陷类型对单层 WTe_2 的光学性质改善最为显著. 在红外光区 (0—1.2 eV), 其吸收系数、反射率、静介电常数和介电函数虚部峰值分别较本征单层 WTe_2 提升了 3.76 倍、1.83 倍、2.63 倍和 24.20 倍.

该研究拓宽了单层 WTe_2 在红外光传感领域的应用, 为研发低维度的光学器件提供了理论支持.

参考文献

- [1] Wu D, Mo Z H, Li X, Ren X Y, Shi Z F, Li X J, Zhang L, Yu X C, Peng H X, Zeng L H, Shan C X 2024 *Appl. Phys. Rev.* **11** 041401
- [2] Zhu S H, Liu H, Wu J X, Mei J L, Zhang R, Liu Y, Chen Y, Cai X H 2025 *ACS Appl. Mater. Int.* **17** 22060
- [3] Song T C, Jia Y, Yu G, Tang Y, Uzan A J, Zheng Z Y J, Guan H S, Onyszczak M, Singha R 2025 *Phys. Rev. Res.* **7** 013224
- [4] Kim H, Yoo Y D 2025 *Adv. Sci.* **12** 2500516
- [5] Yang H, Synnatschke K, Yoon J, Mirhosseini H, Hermes I M, Li X D, Neumann C, Morag A, Turchanin A, Kühne T D, Parkin S S P, Yang S, Nia A S, Feng X L 2025 *ACS. Nano.* **19** 14309
- [6] Song T C, Jia Y Y, Yu G, Tang Y, Wang P J, Singha R, Gui X, Uzan-Narovlansky A J, Onyszczak M, Watanabe K, Taniguchi T, Cava R J, Schoop L M, Ong N P, Wang S F 2024 *Nat. Phys.* **20** 269
- [7] Xu S Y, Ma Q, Shen H T, Fatemi V, Wu S F, Chang T R, Chang G Q, Mier Valdivia A M, Chan C K, Gibson Q D, Zhou J D, Liu Z, Watanabe K, Taniguchi T, Lin H, Cava R J, Fu L, Gedik N, Jarillo-Herrero P 2018 *Nat. Phys.* **14** 900
- [8] Liu X, Zhao H Q, Chen Y, Liang X X, Liu S X, Huang Z Q, Wu Z P, Mao Y L, Shi X 2024 *Mater. Today Chem.* **38** 102077
- [9] Liu Y W, Xiao C, Li Z, Xie Y 2016 *Adv. Energy Mater.* **6** 1600436
- [10] Li J, Liang Y C, Li X X, Wei G M, Zhang Z H, Chen Q 2025 *Mole. Catal.* **579** 115048
- [11] Schuler B, Qiu D Y, Refaely-Abramson S, Kastl C, Chen C, Barja S, Koch R, Ogletree F, Aloni S 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 076801
- [12] Yelgel C, Yelgel Ö C 2024 *Model. Sim. Mater. Sci. Eng.* **32** 085016
- [13] Wu D, Guo J W, Wang C Q, Ren X Y, Chen Y S, Lin P, Zeng L H, Shi Z F, Li X J, Shan C X, Jie J S 2021 *ACS Nano* **15** 10119
- [14] Torun E, Sahin H, Cahangirov S, Rubio A, Peeters F M 2016 *J. Appl. Phys.* **119** 074307
- [15] Liu Y, Huang Y Q, Zhao Y J, Bai G X, Xu S Q 2021 *Las. Opt. Prog.* **58** 1516014 (in Chinese) [刘源, 黄友强, 赵英杰, 白功勋, 徐时清 2021 *激光与光电子学进展* **58** 1516014]
- [16] Xu D, Chen W Y, Zeng M Q, Xue H F, Chen Y X, Sang X H, Xiao Y, Zhang T, Unocic R R, Xiao K, Fu L 2018 *Angew. Chem. Int. Edit.* **57** 755
- [17] Li L S, Carter E A 2019 *J. Am. Chem. Soc.* **141** 10451
- [18] Chiritescu C, Cahill D, Nguyen N, Johnson D, Bodapati A, Keblinski P, Zschack P 2007 *Science* **315** 351
- [19] Clark S J, Segall M D, Pickard C J, Hasnip P J, Probert M I J, Refson K, Payne M C 2005 *Z. Krist. Cryst. Mater.* **220** 567
- [20] Frommer B G, Côté M, Louie S G, Cohen M L 1997 *J. Comput. Phys.* **131** 233
- [21] Yang Z H, Wang X Y, Su X P 2012 *J. Central South Univ.* **19** 1796
- [22] Luo L, Zhu H Q, Yin K H, Wu Z B, Xu F X, Gao T J, Yue Y X, Chen J J, Feng Q, Yang Y, Jia W Y 2024 *ACS Ome.* **10** 1486
- [23] Chauhan I, Kaur M, Singh K, Kumar A 2025 *Adv. Semi.* **1** 169
- [24] Du D X, Flannigan D J 2020 *Struc. Dynam.* **7** 024103
- [25] Saraswat R, Kolos M, Verma R, Karlický F, Bhattacharya S 2024 *J. Phys. Chem. C* **128** 8341
- [26] Basiuk V A, Henao-Holguín L V 2014 *J. Comp. Theo. Nano.* **11** 1609
- [27] Tong Z, Dumitrică T, Frauenheim T 2021 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** 19627

First-principles study on optical properties of rare-earth doped monolayer WTe_2 with single tellurium vacancies^{*}

YIN Kaihui¹⁾ ZHU Hongqiang^{1)†} XU Fengxia¹⁾ WU Zebang¹⁾
 GAO Tianjun¹⁾ YANG Ying¹⁾ FENG Qing¹⁾
 YUE Yuanxia¹⁾ JIA Weiyao^{2)‡}

1) (*College of Physics and Electronic Engineering, Chongqing Normal University, Chongqing 401331, China*)

2) (*School of Physical Science and Technology, Southwest University, Chongqing 400715, China*)

(Received 2 September 2025; revised manuscript received 1 October 2025)

Abstract

Using first-principles calculations based on density functional theory with a plane-wave ultrasoft pseudopotential approach, we conduct computations using the CASTEP (Cambridge Sequential Total Energy Package) module within the Materials Studio software. The electronic band structures, densities of states, and optical properties of intrinsic monolayer WTe_2 , monolayer WTe_2 with a single tellurium vacancy (V_{Te}), and rare-earth-doped V_{Te} -containing monolayer WTe_2 ($V_{\text{Te}}\text{-}X$, where $X = \text{Ce}, \text{Yb}, \text{Eu}$) are systematically investigated to explore the synergistic effects of rare-earth doping and tellurium vacancy defects on the optical properties of monolayer WTe_2 . The results indicate that compared with the V_{Te} model, the $V_{\text{Te}}\text{-}X$ models lead to a more pronounced enhancement of the optical performance in the infrared region (0–1.2 eV). All of $V_{\text{Te}}\text{-}X$ structures exhibit metallic characteristics, with a notable increase in the density of states near the Fermi level. In particular, the $V_{\text{Te}}\text{-Yb}$ model demonstrates significant improvement in the infrared range: the absorption coefficient, reflectivity, static dielectric constant, and peak value of the imaginary part of the dielectric function are enhanced by factors of 3.76, 1.83, 2.63, and 24.20, respectively, compared with those of pristine monolayer WTe_2 . This study provides a theoretical foundation for designing infrared photodetectors based on monolayer WTe_2 substrates.

Keywords: monolayer WTe_2 , first principles, optical property

PACS: 31.15.A–, 61.50.Ah, 61.72.jd

DOI: [10.7498/aps.74.20251196](https://doi.org/10.7498/aps.74.20251196)

CSTR: [32037.14.aps.74.20251196](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20251196)

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Chongqing, China (Grant Nos. CSTB2023NSCQ-MSX0207, CSTB2023NSCQ-MSX0425) and the Science and Technology Research Program of Chongqing Municipal Education Commission, China (Grant Nos. KJQN202200569, KJQN202200507, KJQN202300513, KJZD-K202300516).

[†] Corresponding author. E-mail: 20132013@cqnu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: wujia@swu.edu.cn

稀土元素掺杂含单碲空位缺陷单层WTe₂光学性质的第一性原理

尹开慧 朱洪强 徐凤霞 吴泽邦 高田军 杨英 冯庆 岳远霞 贾伟尧

First-principles study on optical properties of rare-earth doped monolayer WTe₂ with single tellurium vacancies

YIN Kaihui ZHU Hongqiang XU Fengxia WU Zebang GAO Tianjun YANG Ying FENG Qing YUE Yuanxia JIA Weiyao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 223101 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20251196

CSTR: 32037.14.aps.74.20251196

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251196>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

In掺杂 h -LuFeO₃光吸收及极化性能的第一性原理计算

First principles calculation of optical absorption and polarization properties of In doped h -LuFeO₃

物理学报. 2021, 70(3): 037101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201287>

单层缺陷碲烯电子结构与光学性质的第一性原理研究

First-principles study of electronic structure and optical properties of monolayer defective tellurene

物理学报. 2021, 70(16): 166301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210271>

单层CrI₃电荷输运性质和光学性质应变调控的第一性原理研究

First-principles study of strain-tunable charge carrier transport properties and optical properties of CrI₃ monolayer

物理学报. 2022, 71(20): 207102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221019>

二维WTe₂晶格对称性的光学研究

Optical study on crystal symmetry of two-dimensional WTe₂

物理学报. 2022, 71(17): 176301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220804>

单层1T-CoI₂中Kitaev作用的第一性原理研究

First-principles study of role of Kitaev interaction in monolayer 1T-CoI₂

物理学报. 2023, 72(24): 247101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230909>

基于第一性原理研究杂质补偿对硅光电性能的影响

First-principles study of effect of impurity compensation on optical properties of Si

物理学报. 2024, 73(11): 116301 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231814>