

Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)电学、磁学及光学性质的第一性原理研究

姚云美, 肖清泉, 付莎莎, 邹梦真, 唐华著, 张瑞亮, 谢 泉
(贵州大学 大数据与信息工程学院 新型光电子材料与技术研究所, 贵州 贵阳 550025)

摘 要: 直接带隙半导体碲化镓 (GaSb) 凭借其优异的性能在光纤通信、光电器件等领域具有应用价值。为了拓展 GaSb 在光电器件中应用及探索新的自旋电子学材料, 采用第一性原理计算了不同 Ti 掺杂浓度的 GaSb (Ga_{1-x}Ti_xSb, 其中 x 为 Ti 原子的掺杂原子分数) 的电学、磁学及光学性质。计算结果表明: Ga_{1-x}Ti_xSb 的能带结构和态密度在费米能级附近产生自旋劈裂并形成净磁矩, 使 Ga_{1-x}Ti_xSb($x=0.25, 0.50, 0.75$) 分别表现为半金属铁磁体、稀磁半导体、磁性金属。Ga_{1-x}Ti_xSb 优化后晶格常数变大。Ga_{1-x}Ti_xSb 的折射率、反射率、吸收系数发生红移且在中远红外波段光吸收系数高于 GaSb; Ga_{1-x}Ti_xSb 随着 Ti 掺杂浓度的增加对中远红外波段光子的吸收效果变得更好。计算结果为拓展 GaSb 基半导体材料在红外探测器、红外半导体激光器等领域的应用以及新的自旋电子学材料的发现提供理论参考。

关键词: 第一性原理; GaSb; Ti 掺杂; 电子结构; 磁学性质; 光学性质

中图分类号: TQ133.5⁺1; O472

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2023)10-3571-10

1983 年, Groot 等人^[1]通过对三元赫斯勒 (Heusler) 合金 NiMnSb 和 PtMnSb 等的研究, 首次发现了一种新型的能带结构, 其中一个方向电子自旋能带呈现金属性, 而另一个方向的电子自旋能带呈现半导体性, 并把这种有着特殊能带结构的材料命名为“半金属铁磁体 (half-metal ferromagnet, HMF)”^[2]。半金属铁磁体和稀磁半导体统称为磁性半导体, 磁性半导体是自旋电子学领域的关键材料, 它结合了电子的电荷属性和自旋属性, 其中稀磁半导体兼具半导体材料和磁性材料的双重特性, 是破解摩尔定律难题的方案之一^[3-7]。如果能在材料中同时应用电子的电荷和自旋属性, 出现所谓的稀磁半导体, 则有望在自旋电子器件中发挥巨大作用。通过以往的相关研究发现, 引入高浓度的磁性离子使非磁性半导体出现磁性, 甚至铁磁化^[8]; 用磁性过渡金属元素离子注入二元半导体, 发现了同时具有磁性和半导体特性的新型磁性材料。叶建峰等人^[9]研究表明掺杂低浓度的 Ti、V、Ni 后, 成功打开了二维 CrSi₂ 的带隙, 导致其分别向间接半导体、稀磁半导体和半金属铁磁体转变并拥有良好的光学性质。王满富等人^[10]研究发现 Ti 掺杂 LiZnAs 会引入磁性, 并且 Ti 掺杂后 LiZnAs 的形成能均小于 0,

各组态可以稳定存在。Xiong 等人^[11]对掺杂 Ti 浓度 (原子分数, 下同) 为 6.25% 的 GaN 进行研究, 研究表明 Ti 掺杂 GaN 后体系具有自旋极化和有序铁磁, 形成了稀磁半导体。张琴等人^[12]研究表明 K、Ti 掺杂 Mg₂Si 后, Mg₂Si 的静介电常数变大, 使得掺杂体系对电荷的束缚能力增强, 明显改善了 Mg₂Si 的光学性质。Cui 等人^[13]利用密度泛函理论研究了 Ti 掺杂 GaN 纳米线后在其禁带中形成深能级并减少了其禁带宽度, 掺杂后静介电常数变大。

近年来碲化物半导体产业链迅速发展, 人们对碲化物材料各方面性质进行了广泛而深入的研究。碲化物材料中直接带隙半导体碲化镓 (GaSb) 作为第 4 代半导体器件技术的潜在目标材料, 具有电子迁移率高、高频低阈值、光电转化效率高等特点^[14-18], 同时其晶格常数与其他各种三元、四元的 III-V 族化合物半导体材料的晶格常数近似匹配, 可以大大减少由晶格失配导致的应力、缺陷等问题, 因此成为制备长波 LED 及光电探测器、光纤通信器件的重要衬底材料^[19-21], 在光纤通信、光电器件领域具有很大的潜在应用价值。本征 GaSb 半导体的禁带宽度与近红外波段的光谱匹配较好, 却不能很好地吸收利用中远红外波段 (3~1000 μm) 的光子, 限制了

收稿日期: 2022-10-08

基金项目: 贵州大学智能制造产教融合创新平台及研究生联合培养基地建设项目 (2020-520000-83-01-324061); 贵州省留学回国人员科技活动择优资助项目 ([2018]09); 贵州省高层次创新型人才培养项目 ([2015]4015)

作者简介: 姚云美, 女, 1999 年生, 硕士生, 贵州大学大数据与信息工程学院, 新型光电子材料与技术研究所, 贵州 贵阳 550025, E-mail: 1637674000@qq.com

其在红外领域的发展与应用。研究表明通过掺杂过渡金属元素可改变被掺杂半导体的电子结构，从而改善半导体的电学和光学性质并使其具有磁性性质^[22-25]。通过掺杂等方法调控半导体各方面性能成为近年来的研究热点之一。

有关 GaSb 材料的掺杂调控，Señal 等人^[26]利用密度泛函理论方法研究了 Mn 掺杂 GaSb，发现掺杂后的材料具有铁磁半金属性质。除此之外，发现 Te 和 Be 掺杂 GaSb，且作钝化处理之后，提高了 GaSb 材料的发光性能^[27-28]；另外通过较高浓度的 3d 过渡族金属元素 V、Cr、Mn、Fe、Co、Ni 的掺杂可以降低 GaSb 的有效带隙^[29-31]，增强材料对红外光的吸收能力。

目前对于 Ti 掺杂 GaSb 的光电性质的理论计算尚未见报道，本文基于第一性原理计算的方法^[32]研究了本征 GaSb 以及高浓度的 3d 过渡金属元素 Ti 掺杂后的 GaSb 的磁学、电学和光学性质，期望研究结果能为拓展 GaSb 基半导体材料在红外探测器、红外半导体激光器等领域的应用以及新的自旋电子学材料的发现提供理论参考。

1 理论模型与计算方法

GaSb 晶体具有闪锌矿（zinc-blende, ZB）结构，空间群是 $F\bar{4}3m$ (空间群编号 216)^[33-34]。图 1 是 GaSb 的晶胞结构模型，晶胞中含有 4 个 Ga 原子和 4 个 Sb 原子，原子摩尔比为 1:1，晶格常数为： $a=b=c=0.6095$ nm，晶面角为： $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。以本征 GaSb 的晶胞为基体，分别用 1 个、2 个和 3 个 Ti 原子取代相同个数的 Ga 原子，即注入 Ti 比例分别为 25%，50%，75%，并且考虑掺杂原子位置得到掺杂体系的模型如图 2~4 所示。

计算采用基于密度泛函理论框架下的 Vienna ab-initio simulation package (VASP) 软件包完成^[35]。计算中选择投影缀加波 (projector augmented wave, PAW)^[36]方法，采用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA)^[37]下的 PBE^[38]泛函来描述体系的交换关联泛函，力收敛精度设为 0.2 eV/nm，能量收敛判据设为 10^{-8} eV。

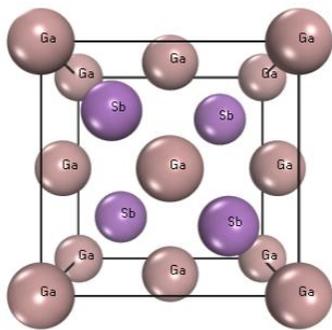


图 1 GaSb 晶胞结构模型
Fig.1 Structural model of crystalline GaSb

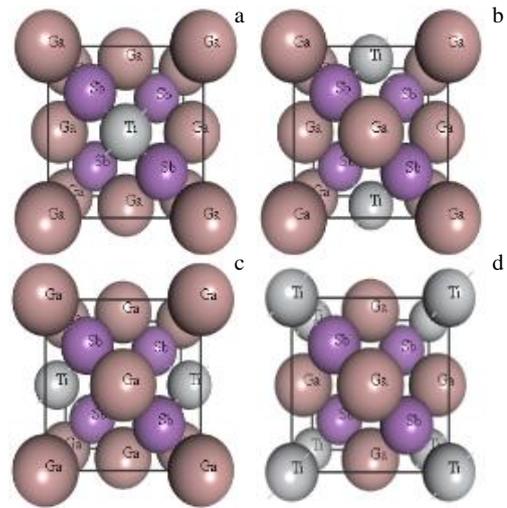


图 2 $Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb$ 晶胞结构模型
Fig.2 Structural models of crystalline $Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb$: (a) M_1 structure, (b) M_2 structure, (c) M_3 structure, and (d) M_4 structure

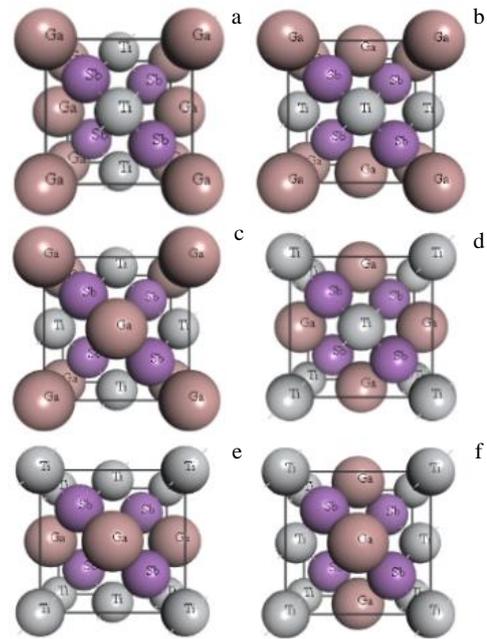


图 3 $Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb$ 晶胞结构模型
Fig.3 Structural models of crystalline $Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb$: (a) M_1 structure, (b) M_2 structure, (c) M_3 structure, (d) M_4 structure, (e) M_5 structure, and (f) M_6 structure

对截断能作收敛测试以确保参数大小设置足够，测试范围为 250~500 eV，每隔 50 eV 测试一次，测试后确定截断能为 400 eV。倒空间由 k 点^[39]网格均匀间距的 Gamma 方案均匀采样，经过 k 点收敛测试，计算 GaSb 时 k 点设置为 $4 \times 4 \times 4$ 。由于掺入的杂质是 Ti 原子，其电子轨道结构为 $3d^2 4s^2 3p^6$ 并且表现为顺磁性，所以在计算过程中打开了自旋。能带结构和光学性质的计算数据均采用 VASPKIT^[40]进行后处理。相应原子的价电子态为：Ga

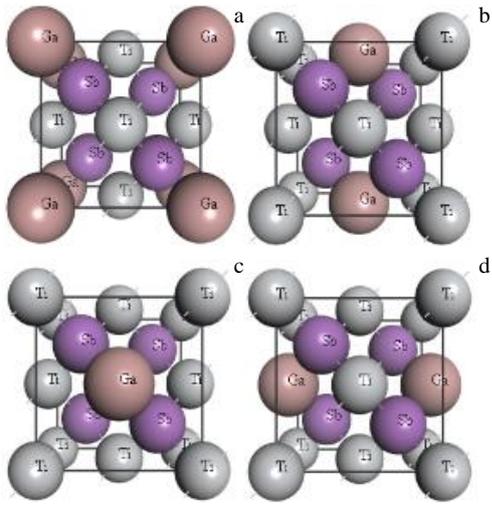


图 4 $\text{Ga}_{0.25}\text{Ti}_{0.75}\text{Sb}$ 晶胞结构模型

Fig.4 Structural models of crystalline $\text{Ga}_{0.25}\text{Ti}_{0.75}\text{Sb}$: (a) M_1 structure, (b) M_2 structure, (c) M_3 structure, and (d) M_4 structure

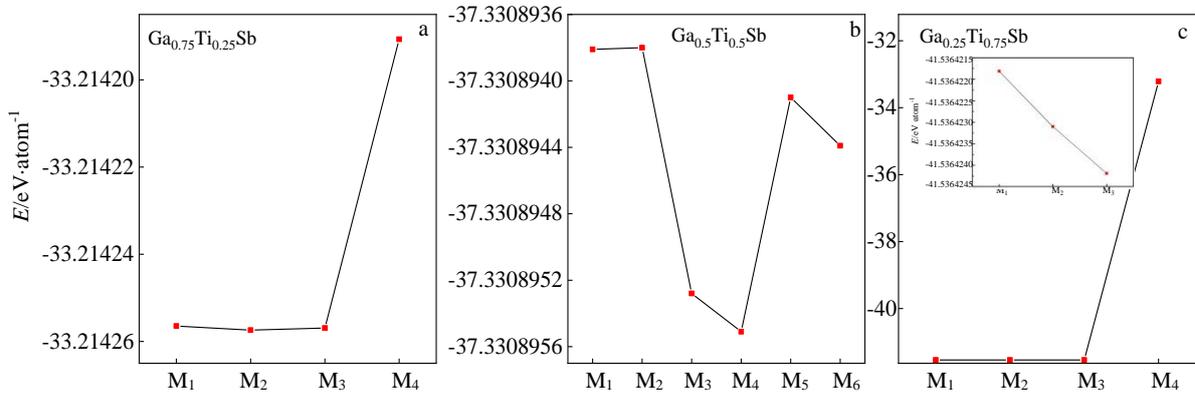


图 5 $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的总能量

Fig.5 Total energy of $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}(x=0.25, 0.50, 0.75)$

体形成的难易程度和表征掺杂体系的稳定性的一个重要指标, 形成能越低, 说明结构稳定性越高。Ti@Ga 和 Ti@Sb 掺杂后的形成能可由公式 (1) 计算得出:

$$E_{\text{formation}} = E_{\text{defect}} - E_{\text{perfect}} - \sum_i n_i \mu_i \quad (1)$$

式中: E_{defect} 为掺杂后的体系的总能量; E_{perfect} 为本征体系的总能量; n_i 代表掺杂后的体系中掺杂原子的数目(增加原子时 $n_i > 0$, 减少原子时则 $n_i < 0$); i 表示掺杂原子的种类; μ_i 是相应掺杂原子的化学势, Ga 原子的化学势为 -0.22 eV , Sb 原子的化学势为 -1.43 eV , Ti 原子的化学势为 -2.33 eV 。

表 1 列出了 XTi@Ga 和 XTi@Sb ($X=1, 2, 3$) 掺杂后的形成能。从表 1 可以看出, XTi@Sb 掺杂后的形成能普遍大于 XTi@Ga 掺杂后的形成能, 因此在 Ti 掺杂的 GaSb 中, 主要以 XTi@Ga 掺杂为主。这也与前人做的研究相符, 而且实验上和理论上已经证实^[42-45]。

为 $3d^{10}4s^24p^1$ 、Sb 为 $4d^{10}5s^25p^3$ 、Ti 为 $3d^24s^23p^6$ 。由于 GGA 和 LDA 的方法通常会低估带隙的值, 所以选用 HSE06^[41] 杂化泛函计算能带, 使能带的计算结果更加接近实验值。

2 结果与分析

2.1 不同 Ti 浓度下及掺杂在不同位置的体系能量分析

对不同 Ti 浓度下及掺杂在不同位置的体系总能量和能带结构进行讨论, 图 5 列出了 $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的总能量。

由图 5 可知, 相同浓度不同结构下体系的总能量是不一样的, 由能量越低越稳定原则可知, 在图 5a 中, M_2 结构的能量最低即 M_2 结构是最稳定的。同理, 在图 5b 和图 5c 中, M_4 结构和 M_3 结构最稳定。并且随着 Ti 原子浓度的升高, $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的总能量越来越低。

2.2 Ti@Ga 和 Ti@Sb 掺杂后的形成能分析

形成能常常是在材料生长过程中用来衡量掺杂后晶

表 1 XTi@Ga 和 XTi@Sb ($X=1, 2, 3$) 掺杂后的形成能

Table 1 Formation energies of XTi@Ga and XTi@Sb ($X=1, 2, 3$) after doping (eV)

| | $X=1$ | $X=2$ | $X=3$ |
|-----------------|---------|---------|---------|
| XTi@Ga | -1.5344 | -3.3434 | -5.3348 |
| XTi@Sb | 0.4533 | 0.1992 | -0.1526 |

2.3 几何优化结果分析

表 2 列出了 GaSb 和 $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的几何优化结果, 由表 2 可知, 相比 GaSb, $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的晶格常数都有不同程度的增大, 这是由于在几何优化的过程中, Ti 原子的半径与 Ga 原子的半径存在差异, 晶胞中的原子由于正负电荷位置重新调整使库伦相互作用发生了改变, 晶格常数从而也跟着发生变化所造成的。

表 2 GaSb 和 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)的几何优化结果

Table 2 Geometry optimization results for GaSb and Ga_{1-x}Ti_xSb (x=0.25, 0.50, 0.75)

| System | a/nm | b/nm | c/nm | V/nm ³ |
|----------------------|--------|--------|--------|-------------------|
| GaSb | 0.6193 | 0.6193 | 0.6193 | 0.2375 |
| 25%Ti-M ₁ | 0.6234 | 0.6234 | 0.6234 | 0.2423 |
| 25%Ti-M ₂ | 0.6234 | 0.6234 | 0.6234 | 0.2423 |
| 25%Ti-M ₃ | 0.6234 | 0.6234 | 0.6234 | 0.2423 |
| 25%Ti-M ₄ | 0.6234 | 0.6234 | 0.6234 | 0.2423 |
| 50%Ti-M ₁ | 0.6361 | 0.6216 | 0.6216 | 0.2459 |
| 50%Ti-M ₂ | 0.6361 | 0.6216 | 0.6216 | 0.2459 |
| 50%Ti-M ₃ | 0.6361 | 0.6216 | 0.6216 | 0.2459 |
| 50%Ti-M ₄ | 0.6361 | 0.6216 | 0.6216 | 0.2459 |
| 50%Ti-M ₅ | 0.6361 | 0.6216 | 0.6216 | 0.2459 |
| 50%Ti-M ₆ | 0.6361 | 0.6216 | 0.6216 | 0.2459 |
| 75%Ti-M ₁ | 0.6265 | 0.6265 | 0.6265 | 0.246 |
| 75%Ti-M ₂ | 0.6265 | 0.6265 | 0.6265 | 0.246 |
| 75%Ti-M ₃ | 0.6265 | 0.6265 | 0.6265 | 0.246 |
| 75%Ti-M ₄ | 0.6265 | 0.6265 | 0.6265 | 0.246 |

2.4 磁性质与电子结构

2.4.1 磁性质

表 3 列出了 GaSb 与 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)的总磁矩 M_{tot}、Ga 原子的局部磁矩 M_{Ga}、Sb 原子的局部磁矩 M_{Sb} 和 Ti 原子的局部磁矩 M_{Ti}。从表 3 可以看出, GaSb 并没有磁性, 符合半导体的性质, 这与王闯等^[31]的研究相一致。掺杂 25%浓度的 Ti 原子后, Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb 的磁矩由 GaSb 的 0 μB 变为 0.925 μB; 掺杂 50%浓度的 Ti 原子后, Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb 的磁矩由 GaSb 的 0 μB 变为 0.948 μB; 掺杂 75%浓度的 Ti 原子后, Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb 的磁矩由 GaSb 的 0 μB 变为 2.388 μB。相比 GaSb, Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)具有磁矩且磁矩主要是由 Ti 原子所贡献。

表 3 GaSb 与 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)的总磁矩 M_{tot}、Ga 原子的局部磁矩 M_{Ga}、Sb 原子的局部磁矩 M_{Sb} 和 Ti 原子的局部磁矩 M_{Ti}

Table 3 Total magnetic moment M_{tot} of GaSb and Ga_{1-x}Ti_xSb (x=0.25, 0.50, 0.75), and the local magnetic moment of Ga atom, Sb atom and Ti atom

| System | M _{tot} /μB | M _{Ga} /μB | M _{Sb} /μB | M _{Ti} /μB |
|--|----------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| GaSb | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Ga _{0.75} Ti _{0.25} Sb | 0.925 | -0.01 | -0.03 | 1.065 |
| Ga _{0.5} Ti _{0.5} Sb | 0.948 | 0.042 | -0.029 | 0.977 |
| Ga _{0.25} Ti _{0.75} Sb | 2.388 | 0.046 | -0.091 | 0.965 |

2.4.2 能带结构

为了分析不同浓度的 Ti 原子掺杂 GaSb 能带结构的差异, 计算了 GaSb 和 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)的能带结构并对其进行了对比。选取-5~5 eV 的范围观察能带结构的变化情况, 这是因为费米能级附近的能带结构决定着材料的性质。图 6 为 GaSb 晶胞费米面附近的能带结构图, 由图可知其导带底为 0.6904 eV, 价带顶为 -0.1684 eV, 导带底和价带顶都位于同一高对称点 Γ 点, 且其费米能级靠近半导体价带顶部。由以上分析可知 GaSb 是直接带隙的 P 型半导体且其带隙为 0.8588 eV。计算得到的结果与潘凤春等人^[30]的理论计算结果 0.812 eV、郭宝增^[46]的实验值 0.822 eV 非常接近。由于在 2.1 节中已经讨论出 Ti 掺杂浓度为 25%、50%和 75%时最稳定的掺杂结构, 所以在图 7 中仅画出 25%Ti-M₂ 结构、50%Ti-M₄ 结构和 75%Ti-M₃ 结构的能带结构, 其中图 7a 是自旋向上能带, 图 7b 是自旋向下能带。

由图 7 可以看出, 在掺杂 Ti 浓度为 25%、50%和 75%的 GaSb 中, 自旋向上和自旋向下能带结构均不对称, 这表明 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)均具有磁性。除此之外, 与 GaSb 相比, Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)其能级变得更密集, 这主要是 Ti 3d 态价电子引起的。

对掺杂 Ti 原子浓度为 25%的 GaSb 的能带结构分析可知, 自旋向上的能带结构其费米能级贯穿于杂质带中; 自旋向下的能带结构有禁带宽度, 其导带底为 0.538 eV, 价带顶为-0.897 eV, 导带底和价带顶都位于同一高对称点 Γ 点, 禁带宽度为 1.433 eV, 费米能级出现在接近禁带宽度的导带底部的位置, 这就使得在费米能级处自旋极化率达到 100%。故当 Ti 原子的掺杂浓度为 25%时, Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb 表现为半金属铁磁体。

对掺杂 Ti 原子浓度为 50%的 GaSb 的能带结构分析可知, 自旋向上和自旋向下的能带结构均有禁带宽度, 但自旋向上的能带结构的禁带宽度不大。在自旋向上的能带结构中, 其导带底为 0.076 eV, 价带顶为-0.045 eV,

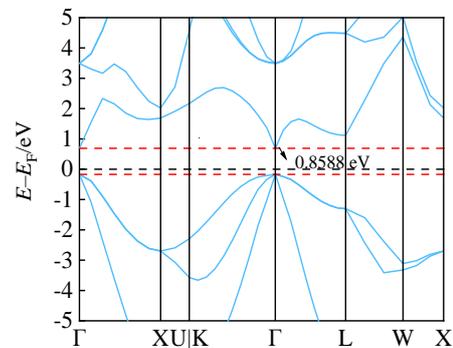


图 6 本征 GaSb 的能带结构图

Fig.6 Energy band structure of intrinsic GaSb

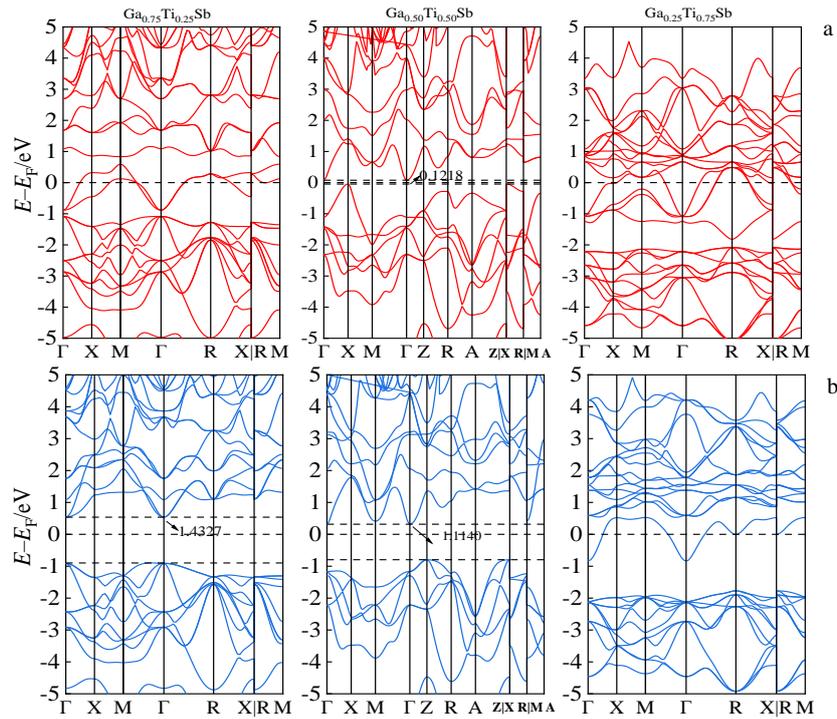


图 7 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)的能带结构图

Fig.7 Energy band structures of Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75): (a) spin-up electron band structure; (b) spin-down electron band structure

导带底和价带顶分别位于高对称点 Γ 点和高对称点 X 点, 禁带宽度为 0.122 eV, 费米能级出现在接近禁带宽度的价带顶部的位置。在自旋向下的能带结构中, 其导带底为 0.317 eV, 价带顶为 -0.795 eV, 导带底和价带顶分别位于高对称点 Γ 点和高对称点 Z 点, 禁带宽度为 1.114 eV, 费米能级出现在接近禁带宽度的导带底部的位置。故当 Ti 原子的掺杂浓度为 50% 时, Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb 表现为稀磁半导体。

对掺杂 Ti 原子浓度为 75% 的 GaSb 的能带结构分析可知, 由于 Ti 原子取代 Ga 原子并与 Sb 原子之间形成共价键后, 留下了未配对的 3d 态价电子, 这些电子参与导电后, 使得体系中的电子浓度高于空穴浓度, 大量电子从禁带跃迁至导带, 故体系的导带底穿过费米能级, 表明体系呈金属性, 导电性增强。故当 Ti 原子的掺杂浓度为 75% 时, Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb 表现为磁性金属。

2.4.3 态密度

体系的导电性能可根据态密度做出判断, 因为大多数材料的电子性质、光学性质等都是来自原子之间 p-d、d-d 和 s-p-d 电子轨道杂化, 这与各原子电子组态以及各原子间电子轨道杂化有关^[47-50]。图 8、图 9、图 10、图 11 分别为 GaSb、Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb、Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb 和 Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb 的态密度 (DOS) 曲线。由图 8 可以看出, 在 -5~0 eV 范围内, 也即价带的范围, GaSb 态密度的主要贡献者为 Ga 的 4p 态价电子和 Sb 的 5p 态价电子, 其

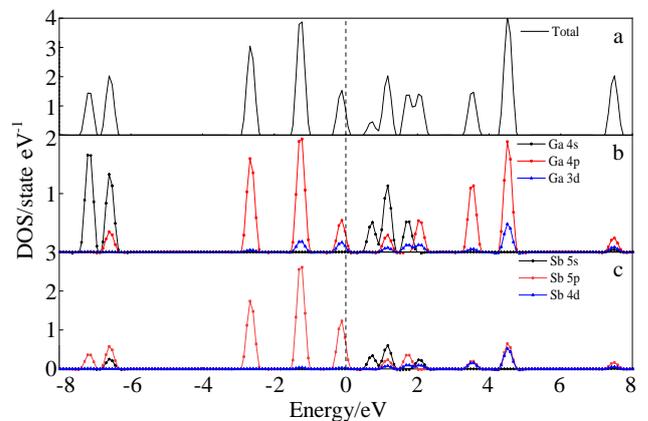


图 8 GaSb 的总态密度和分态密度

Fig.8 Total (a) and partial (b, c) densities of states of GaSb

中 Sb 的 5p 态价电子对价带的贡献比 Ga 的 4p 态价电子大; 在 0~5 eV 范围内, 也即导带的范围, GaSb 态密度的主要贡献者为 Ga 的 4s 态价电子和 Ga 的 4p 态价电子, 除此之外, Sb 的 5s 态价电子也做了少量贡献。

图 9 为 Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb 的态密度 (DOS) 曲线。掺入 25% 浓度的 Ti 后, 总态密度在费米能级附近发生自旋劈裂, Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb 中各电子的自旋状态重新分布, 使得各电子在费米面附近占据的状态数不再相等, 产生了净磁矩。费米能级处于自旋向上的杂质带中, 位于自旋向下的带隙中, Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb 具有半金属性。Ga 4s 态、

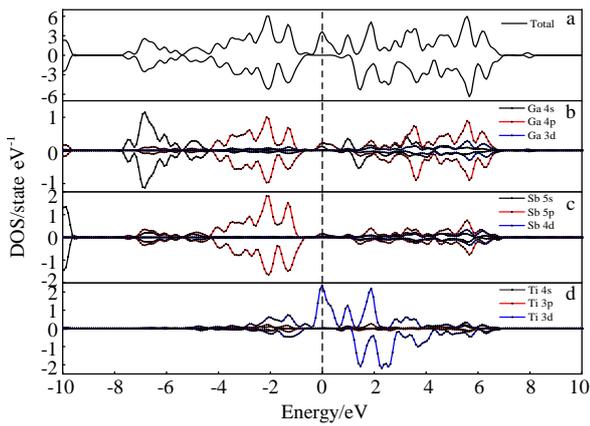


图 9 Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb 的总态密度和分态密度

Fig.9 Total (a) and partial (b-d) densities of states of Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb

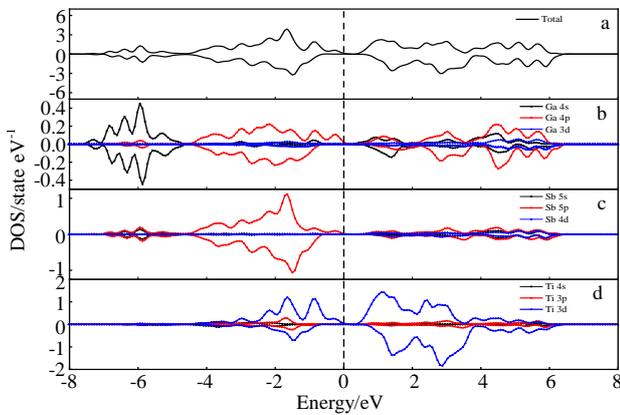


图 10 Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb 的总态密度和分态密度

Fig.10 Total (a) and partial (b-d) densities of states of Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb

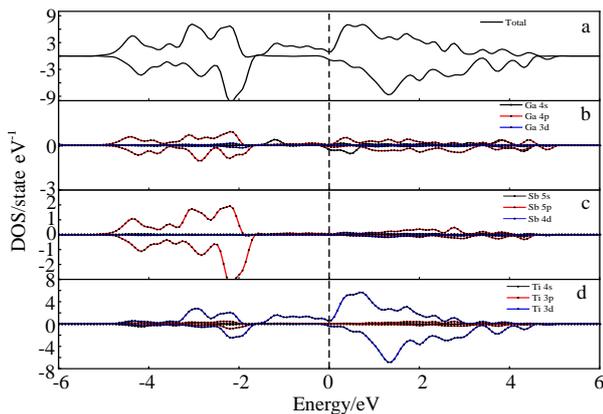


图 11 Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb 的总态密度和分态密度

Fig.11 Total (a) and partial (b-d) densities of states of Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb

Ga 4p 态、Sb 5s 态、Sb 5p 态、Ti 3p 态和 Ti 3d 态的自旋向上和自旋向下价电子数均不相同,在 Ga 4s 态、Sb 5p 态、Ti 3p 态和 Ti 3d 态中两者差别较大。因此 Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb 的磁矩主要由 Ga 4s 态、Sb 5p 态、Ti 3p 态和 Ti 3d 态价电子做贡献,其中 Ti 3d 态价电子的贡献最

大并且体现在 0~5 eV 范围内。Ti 3d 态的自旋向上态密度与自旋向下态密度不对称,诱导极化了费米能级的 Ga 4s 态和 Sb 5p 态产生自旋, Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb 因此产生磁矩,且净磁矩为 0.925 μB。

图 10 为 Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb 的 DOS 曲线。掺入 50% 浓度的 Ti 后,总态密度在费米能级附近发生自旋劈裂, Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb 中各电子的自旋状态重新分布,使得各电子在费米面附近占据的状态数不再相等,产生了净磁矩。Ga 4s 态、Ga 4p 态、Sb 5s 态、Sb 5p 态、Ti 3p 态和 Ti 3d 态的自旋向上和自旋向下价电子数均不相同,在 Ga 4p 态、Sb 5p 态、Ti 3p 态和 Ti 3d 态中两者差别较大。因此 Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb 的磁矩主要由 Ga 4p 态、Sb 5p 态、Ti 3p 态和 Ti 3d 态价电子做贡献,其中 Ti 3d 态价电子的贡献最大并且体现在 -5~5 eV 范围内。Ti 3d 态的自旋向上态密度与自旋向下态密度不对称,诱导极化了费米能级的 Ga 4p 态和 Sb 5p 态产生自旋, Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb 因此产生磁矩,且净磁矩为 0.948 μB。

图 11 为 Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb 的 DOS 曲线。掺入 75% 浓度的 Ti 后,总态密度在费米能级附近发生自旋劈裂, Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb 中各电子的自旋状态重新分布,使得各电子在费米面附近占据的状态数不再相等,产生了净磁矩。费米能级均处于自旋向上和自旋向下的杂质带中, Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb 具有金属性。Ga 4s 态、Ga 4p 态、Sb 5p 态、Ti 3p 态和 Ti 3d 态的自旋向上和自旋向下价电子数均不相同,在 Ga 4p 态、Sb 5p 态、Ti 3p 态和 Ti 3d 态中两者差别较大。因此 Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb 的磁矩主要由 Ga 4p 态、Sb 5p 态、Ti 3p 态和 Ti 3d 态价电子做贡献,其中 Ti 3d 态价电子的贡献最大并且体现在 -5~5 eV 范围内。Ti 3d 态的自旋向上态密度与自旋向下态密度不对称,诱导极化了费米能级的 Ga 4p 态和 Sb 5p 态产生自旋, Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb 因此产生磁矩,且净磁矩为 2.388 μB。相比 Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb 和 Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb, Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb 的态密度整体往低能区移动,各个原子的电子轨道在费米能级被允许占据不同态的数目变多从而使得 Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb 的磁矩较大。

对比 GaSb、Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb、Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb 和 Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb 的 DOS 曲线可知,在 0~5 eV 范围内,随着 Ti 浓度的升高, Ga 4p 态、Ga 4d 态、Sb 5p 态、Sb 5d 态价电子对总态密度的贡献逐渐减小。

2.5 电子局域函数分析

为了进一步讨论 GaSb 和 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75) 的电子结构,还计算了 GaSb 和 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75) 的电子局域函数。电子局域函数是对在给定点且具有相同自旋的参考电子的邻域中找到电子的可能性的度量,也即电子的空间局部化程度,其计算公式为式(2)^[51]:

$$ELF = 1 / \left\{ 1 + \left(\frac{D_r}{Dh_r} \right)^2 \right\} \quad (2)$$

式中: D_r 是真实电子气密度, Dh_r 是均匀电子气密度。

图 12 是 GaSb 与 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75) 的电子局域函数图, 由图可知, 本征的 Ga 离子和 Sb 离子之间电子局域性低但存在着较强的电荷分布, 说明本征的 Ga 原子与 Sb 原子之间存在着共价键且在(001)面的电子表现为离域特性。与 GaSb 相比, Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75) 都出现了红色区域。这表明掺杂 Ti 后, Ti 周围的电子是高度局域分布的。与态密度相结合分析可知, Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75) 产生性质的变化是由于 Ti 3d 态价电子的加入使得化学键发生改变所导致。

2.6 光学性质分析

固体的光学性质可用第一性原理方法计算。大多数情况下吸收谱、反射率以及折射谱可以用介电函数 $\epsilon(\omega)$ 推导而来, $\epsilon(\omega)$ 的具体公式为^[38]:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (3)$$

其中, $\epsilon_1(\omega)$ 表示实部, $\epsilon_2(\omega)$ 表示虚部, ω 表示频率。

$\epsilon_2(\omega)$ 与电子跃迁有关, $\epsilon_2(\omega)$ 也就是说, 取决于导带电子和价带电子的跃迁。复介电函数的虚部与实部可利用 Kramers-Kronig 色散关系、占据态和非占据态波函数的矩阵来求。其余光学性质可通过介电函数推导得出。参照已有的研究结果, $\epsilon_2(\omega)$ 可表示为^[52]:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2}{m^2\omega^2} \sum_{v,c} \int_{BZ} d^3\kappa \frac{2}{2\pi} |e \cdot M_{cv}(\kappa)|^2 \times \delta[E_c(\kappa) - E_v(\kappa) - \hbar\omega] \quad (4)$$

根据 Kramers-Kronig 色散关系, $\epsilon_1(\omega)$ 可表示为^[52]:

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} M \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (5)$$

可利用公式 (4) 和 (5) 中的 $\epsilon_1(\omega)$ 和 $\epsilon_2(\omega)$ 按下式 (6) ~ (8) 来计算出吸收系数 $\alpha(\omega)$ 、反射率 $R(\omega)$ 和折射率 $n(\omega)$, 其中 $\alpha(\omega)$ 、 $R(\omega)$ 和 $n(\omega)$ 的计算公式如下^[52-53]:

$$\alpha(\omega) = \frac{\sqrt{2}\omega}{c} \left\{ \left[\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega) \right]^{1/2} - \epsilon_1(\omega) \right\}^{1/2} \quad (6)$$

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)} - 1}{\sqrt{\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)} + 1} \right|^2 \quad (7)$$

$$n(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} + \epsilon_1(\omega)}{2} \right]^{1/2} \quad (8)$$

计算并分析了 GaSb 与 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75) 的光学性质。图 13 是 GaSb 和 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75) 介电函数与入射光的关系, 图 14 是 GaSb 和 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75) 吸收系数、反射率以及折射率与入射光的关系。

介电函数实部随入射光子能量的变化表征了半导体材料在外电场作用下的极化程度, 当光子能量为 0 eV 的时候, 介电函数实部对应的数值为静态介电常数。由图 13a 可知, GaSb 的静态介电常数为 51.45; 而 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75) 的静态介电常数分别为 214.48, 45.41, 78.59, 表明 Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb 最容易在外电场的作用下极化。虚部随入射光子能量的变化表征了半导体内部形成电偶极子时所消耗的能量。由图 13b 可

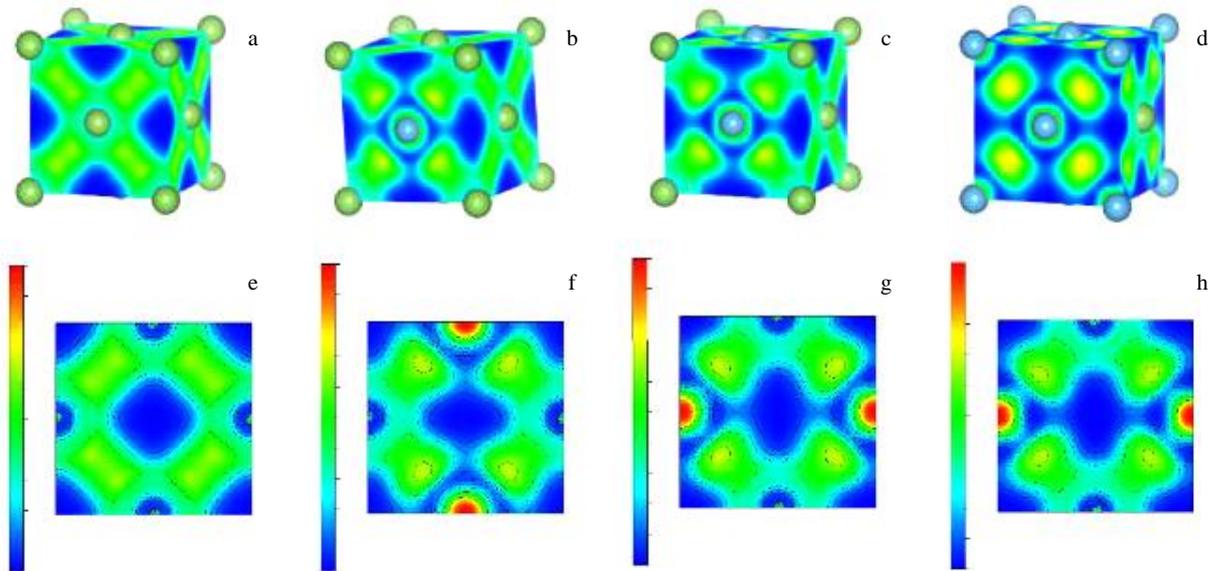


图 12 GaSb 与 Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75) 的电子局域函数图

Fig.12 Electronic localization function graphs of GaSb and Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75): (a-d) 3D local function graph and (e-h) 2D (001) local area function graph

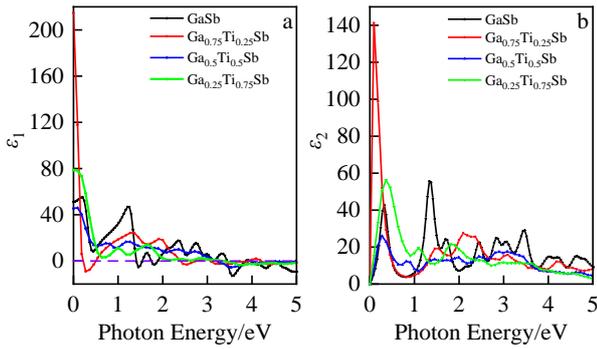


图 13 GaSb 与 $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的介电函数

Fig.13 Dielectric functions of GaSb and $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$: (a) real part of the dielectric function; (b) imaginary part of the dielectric function

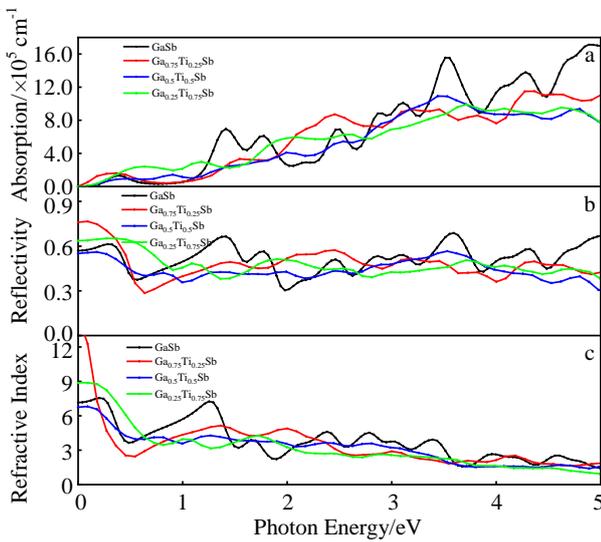


图 14 GaSb 与 $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的吸收系数、反射率和折射率

Fig.14 Optical properties of GaSb and $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$: (a) absorption, (b) reflectivity, and (c) refractive index

知, $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的虚部发生了红移, GaSb 与 $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 主峰的峰值分别为 40.67, 140.47, 24.93, 55.87。

由于波长 380 nm 以前波段也即能量在 3.26 eV 以后的光几乎不能到达地球表面,故选取 0~3 eV 范围的入射光能量进行分析。由图 14a 可以看出,掺杂后的吸收光谱整体向低能区移动,也即发生了红移现象。在 1.89~2.34 eV 范围内,也即 529~656 nm 波长范围内, $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的吸收效果一直优于 GaSb。在 0.09~1.0 eV 范围内,也即 1240~13 777 nm 波长范围内, $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的光吸收系数均能达到 $1 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ 以上并高于 GaSb; $Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb$ 在

0.34 eV 处光吸收系数达到峰值, 峰值为 $1.57 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$; $Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb$ 在 0.9 eV 处光吸收系数达到峰值, 峰值为 $1.5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$; $Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb$ 在 0.63 eV 处光吸收系数达到峰值, 峰值为 $2.4 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ 。与 GaSb 相比, $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 都有效增强了对中远红外波段的吸收效果,且随着掺杂 Ti 浓度的增大,对中远红外波段的吸收效果越好。由图 14b 可知,在光子能量为 0 eV 的时候, GaSb 的反射率为 0.568, 这与王闯等^[31]计算的 0.41 十分接近。而 $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的反射率分别为 0.761, 0.74 和 0.552。可以看出,在光子能量为 0 的时候, $Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb$ 和 $Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb$ 的反射率均大于 GaSb; 而 $Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb$ 与 GaSb 的反射率相差不大。由图 14c 可知,在 1.47~2.04 eV 能量范围内, $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的折射率优于 GaSb 的。在 0.48 eV 时, GaSb 的折射率为 3.62, 这与实验值 3.749^[46]十分接近。随着入射光能量的增加, GaSb 与 $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的折射率逐渐减少并趋于 0。

综上分析可知, $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 在中远红外波段的吸收系数与反射率都有明显升高,表明对中远红外光的吸收能力和反射能力变强。该研究结果可应用于 GaSb 中远红外光器件制备。

3 结 论

1) 基于密度泛函理论 (DFT) 的第一性原理计算表明, 本征的 GaSb 是直接带隙的 P 型半导体且费米能级附近价带的主要贡献来自 Ga 的 4p 态和 Sb 的 5p 态电子, 导带的主要贡献来自 Ga 的 4s、4p 以及 Sb 的 5s 态电子。 $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的态密度在费米能级附近均产生自旋劈裂并形成净磁矩, 其中 $Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb$ 表现为半金属铁磁体, $Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb$ 表现为稀磁半导体, $Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb$ 表现为磁性金属。

2) 在中远红外波段, $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 的光吸收系数高于 GaSb 的光吸收系数, 且随着 Ti 浓度的提高对中远红外波段光子的吸收效果变得越好。 $Ga_{0.75}Ti_{0.25}Sb$ 在 0.34 eV 处光吸收系数达到峰值, 峰值为 $1.57 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$; $Ga_{0.5}Ti_{0.5}Sb$ 在 0.9 eV 处光吸收系数达到峰值, 峰值为 $1.5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$; $Ga_{0.25}Ti_{0.75}Sb$ 在 0.63 eV 处光吸收系数达到峰值, 峰值为 $2.4 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ 。与 GaSb 相比, $Ga_{1-x}Ti_xSb(x=0.25, 0.50, 0.75)$ 折射率、反射率、吸收系数均发生红移。

参考文献 References

[1] de Groot R A, Mueller F M, van Engen P G *et al. Physical Review Letters*[J], 1983, 50(25): 2024
 [2] Meins J F, Schatz C, Lecommandoux S *et al. Materials Today*[J],

- 2014, 17(2): 92
- [3] Deng Zheng(邓 正), Zhao Guoqiang(赵国强), Jin Changqing(靳常青). *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2019, 68(16): 167 502
- [4] Wolf S A, Awschalom D D, Buhrman R A *et al.* *Science*[J], 2001, 294(5546): 1488
- [5] Pearton S J, Abernathy C R, Norton D P *et al.* *Materials Science and Engineering R Reports*[J], 2003, 40(4): 137
- [6] Ohno H, Shen A, Matsukura F *et al.* *Applied Physics Letters*[J], 1996, 69(3): 363
- [7] Munekata H, Ohno H, von Molnar S *et al.* *Physical Review Letters*[J], 1989, 63(17): 1849
- [8] Ohno H. *Science*[J], 1998, 281(5379): 951
- [9] Ye Jianfeng(叶建峰), Qing Mingzhe(秦铭哲), Xiao Qingquan(肖清泉) *et al.* *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2021, 70(22): 227 301
- [10] Wang Manfu(王满富), He Ming(何 明), Cui Yan(崔 岩) *et al.* *Journal of Dalian Jiaotong University*(大连交通大学学报)[J], 2022, 43(1): 68
- [11] Xiong Z H, Shi S Q, Jiang F Y. *Chemical Physics Letters*[J], 2007, 443(1-2): 92
- [12] Zhang Qin(张 琴), Xie Quan(谢 泉), Yang Wensheng(杨文晟) *et al.* *Journal of Synthetic Crystals*(人工晶体学报)[J], 2021, 50(9): 1625
- [13] Cui Z, Ke X Z, Li E L *et al.* *Materials & Design*[J], 2016, 96: 409
- [14] Wei Y, Gin A, Razeghi M *et al.* *Applied Physics Letters*[J], 2002, 80(18): 3262
- [15] Zhang H I, Callaway J. *Physical Review*[J], 1969, 181(3): 1163
- [16] Ahmed R, Fazal E A, Hashemifar S J *et al.* *Communications in Theoretical Physics*[J], 2009, 52(3): 527
- [17] Schottky W F, Bever M B. *Acta Metallurgica*[J], 1958, 6(5): 320
- [18] Milnes A G, Polyakov A Y. *Solid-State Electronics*[J], 1993, 36(6): 803
- [19] Bennett B, Soref R. *IEEE Journal of Quantum Electronics*[J], 1987, 23(12): 2159
- [20] Aspnes D E, Studna A A. *Physical Review B*[J], 1983, 27(2): 985
- [21] Rothmayr F, Pfenning A, Kistner C *et al.* *Applied Physics Letters* [J], 2018, 112(16): 161 107
- [22] Fang Wenjian(房文健), Liu Yongsheng(刘永生), Fang Jin(方津) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2014, 43(7): 1676
- [23] Zhao Hui(赵 慧), Zhao Yuhong(赵宇宏), Yang Xiaomin(杨晓敏) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2015, 44(3): 638
- [24] Mao Fei(毛 斐), Tang Fawei(唐法威), Lv Hao(吕 皓) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2022, 51(2): 535
- [25] Zhang Peixin(张培新), Zhang Dongyun(张冬云), Huang Lei(黄磊) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2013, 42(4): 718
- [26] Seña N, Dussan A, Mesa F *et al.* *Journal of Applied Physics*[J], 2016, 120(5): 051 704
- [27] Rong Tianyu(容天宇), Fang Dan(房 丹), Gu Libi(谷李彬) *et al.* *Acta Photonica Sinica*(光子学报)[J], 2018, 47(3): 031 600 1
- [28] Liu Xue(刘 雪). *Optical Properties of Doped GaSb Films and GaSb Heterojunction*(GaSb 薄膜掺杂及异质结的光学性质研究)[D]. Changchun: Changchun University of Science and Technology, 2017
- [29] Wang Chuang(王 闯). *First-Principles Study of GaSb Doped with Transition Metal(TM=V, Cr, Mn)*(GaSb 掺杂过渡金属(V, Cr, Mn)性质的第一性原理研究)[D]. Yanshan: Yanshan University, 2019
- [30] Pan Fengchun(潘凤春), Lin Xueling(林雪玲), Cao Zhijie(曹志杰) *et al.* *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2019, 68(18): 184 202
- [31] Wang Chuang(王 闯), Zhao Yonghong(赵永红), Liu Yong(刘永). *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2019, 68(17): 176 301
- [32] Peng G W, Gan X P, Li Z *et al.* *Chinese Physics B*[J], 2018, 27(8): 086 302
- [33] Dresselhaus G. *Physical Review*[J], 1955, 100(2): 580
- [34] Cohen M L, Bergstresser T K. *Physical Review*[J], 1966, 141(2): 789
- [35] Kresse G, Furthmüller J. *Physical Review B*[J], 1996, 54(3): 11 169
- [36] Kresse G, Joubert D. *Physical Review B*[J], 1999, 59(3): 1758
- [37] Perdew J P, Chevary J A, Vosko S H *et al.* *Physical Review B*[J], 1993, 48(7): 4978
- [38] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. *Physical Review Letters*[J], 1996, 77(18): 3865
- [39] Monkhorst H J, Pack J D. *Physical Review B*[J], 1976, 13(12): 5188
- [40] Wang V, Xu N, Liu J C *et al.* *Computer Physics Communications*[J], 2021, 267: 108 033
- [41] Batista E R, Heyd J, Hennig R G *et al.* *Physical Review B*[J], 2006, 74(12): 121 102
- [42] Yokoyama M, Nishi K, Kim S *et al.* *Applied Physics Letters*[J], 2014, 104(9): 093 509
- [43] Tu N T, Hai P N, Anh L D *et al.* *Applied Physics Letters*[J], 2014, 105(13): 132 402
- [44] Tu N T, Hai P N, Anh L D *et al.* *Applied Physics Letters*[J], 2016, 108(19): 192 401

- [45] Zota C B, Kim S H, Yokoyama M *et al.* *Applied Physics Express*[J], 2012, 5(7): 071 201
- [46] Guo Baozeng(郭宝增). *Semiconductor Optoelectronics*(半导体光电)[J], 1999(2): 73
- [47] de Paiva R, Nogueira R A, Alves J L A. *Applied Physics Letters* [J], 2004, 96(11): 6565
- [48] Chen Z Y, Xu B, Gao G Y. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*[J], 2013, 347: 14
- [49] Arif S, Ahmad I, Amin B *et al.* *International Journal of Quantum Chemistry*[J], 2012, 112(14): 2668
- [50] Nabi A, Akhtar Z, Iqbal T *et al.* *Journal of Semiconductors*[J], 2017, 38(7): 073 001
- [51] Gibbs G V, Cox D F, Ross N L *et al.* *The Journal of Physical Chemistry A*[J], 2005, 109(44): 10 022
- [52] Fang Rongchuan(方容川). *Solid State Spectroscopy*(固体光谱学)[M]. Hefei: Press of University of Science and Technology of China, 2001: 261
- [53] Dong J T, Zhang F C, Zhang W H *et al.* *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*[J], 2013, 56(4): 706

First Principles Study of the Electrical, Magnetic and Optical Properties of $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$ ($x=0.25, 0.50, 0.75$)

Yao Yunmei, Xiao Qingquan, Fu Shasha, Zou Mengzhen, Tang Huazhu, Zhang Ruiliang, Xie Quan
(Institute of Advanced Optoelectronic Materials and Technology, College of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang 550025, China)

Abstract: Direct band gap semiconductor gallium antimonide (GaSb) has application prospect in fiber optic communication and optoelectronic devices because of its excellent performance. In order to expand the potential application of GaSb in optoelectronic devices and explore new spintronics materials, the electrical, magnetic and optical properties of GaSb with different Ti doping concentrations (denoted as $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$, where x is the atomic percentage of Ti) were calculated by first-principles. The calculated results show that the energy band structure and the density of states of $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$ generate spin splitting near the Fermi level and form a net magnetic moment, making the $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$ ($x=0.25, 0.5, 0.75$) shows characteristics of half-metal ferromagnet, dilute magnetic semiconductor and magnetic metallic, respectively. The lattice constant of $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$ increases after optimization. The refractive index, reflectivity and absorption coefficient of $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$ are red-shifted and the optical absorption coefficients of $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$ are higher than that of undoped GaSb in the middle and far infrared band, and the absorption of $\text{Ga}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$ becomes better in the middle and far infrared band with the increasing in Ti doping concentration. The calculation results provide a theoretical reference for the expansion of GaSb-based semiconductor materials for applications in infrared detectors and infrared semiconductor lasers and the discovery of new spintronics materials.

Key words: first principles study; GaSb; Ti doping; electronic structure; magnetic properties; optical properties

Corresponding author: Xiao Qingquan, Ph. D., Professor, Institute of Advanced Optoelectronic Materials and Technology, College of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang 550025, P. R. China, E-mail: qqxiao@gzu.edu.cn