

应力条件下 GaN 电子结构及光学性质研究

阮兴祥 张富春* 张威虎

延安大学物理与电子信息学院, 陕西 延安 716000

摘要 采用密度泛函理论框架下的第一性原理平面波计算方法,系统研究了不同应力作用下 GaN 的电子结构和光学性质,对比分析了外压调制对 GaN 的能带结构、态密度和光学性质变化的影响。计算结果表明:随着外应力的逐渐增加,Ga—N 的键长逐渐变小,布局数逐渐增加,共价性明显增强,离子性减弱。电子结构计算结果显示导带向高能方向漂移,而整个价带向低能方向漂移,禁带带宽明显被展宽,Ga 原子的 3d 态电子与 N 原子的 2p 态电子的杂化程度增强。光学性质计算结果揭示了在没有应力的作用下,在 1.6 eV 附近开始出现吸收边。随着外应力的逐渐增大,GaN 的复介电函数和吸收谱向高能方向漂移,光谱发生了明显的蓝移现象,进而提高了光电转换效率。

关键词 光电子学;GaN;第一性原理;光学性质;应力

中图分类号 O472 文献标识码 A doi: 10.3788/LOP51.091604

Study on Electronic Structure and Optical Properties of GaN under Pressure

Ruan Xingxiang Zhang Fuchun Zhang Weihu

College of Physics and Electronic Information, Yan'an University, Yan'an, Shaanxi 716000, China

Abstract Electronic structure and optical properties are systematically investigated by using first-principles plane-wave calculation method based on density functional theory, and the changes in the band structure, density of states and optical properties are comparatively analysed for GaN under pressure. The calculated results indicate that Ga—N bond lengths become shorter, the populations become larger, the covalent becomes stronger and the ionic becomes weaker when the pressure increases. The calculated electronic structure shows that the conduction bands move to high energy direction, while the whole valence bands shift to low energy direction, the band gap becomes wider, the hybridization of 3d states electron of Ga atoms and 2p states electron of N atoms is enhanced significantly. Results of optical properties reveal that absorption spectrum occurs absorption edge near 1.6 eV when there is no stress. With the pressure increasing, the complex dielectric function and absorption spectra of GaN move towards high energy, the absorption spectrum occurs obvious blue shift and the photoelectric conversion efficiency is improved.

Key words optoelectronics; GaN; first-principles; optical properties; pressure

OCIS codes 160.4670; 160.4760; 160.6000

1 引言

氮化镓(GaN)是一种重要的半导体材料,具有较宽的直接带隙、较高的击穿电压、较小的介电常数、较高的发光效率和耐高温等优异的化学和物理稳定特性,是半导体材料和光电器件的研究热点^[1-2]。在紫外半导体探测器、蓝光发光二极管和蓝光激光器等具有潜在的应用前景^[3-4]。

通过掺杂或者引入应力等方式均能够改变晶格常数,进而改变材料的能带结构及其光学特性。目前,

收稿日期: 2014-03-26; 收到修改稿日期: 2014-05-15; 网络出版日期: 2014-07-23

基金项目: 陕西省教育厅专项科研基金(2013JK0917)、延安市工业攻关(2013-KG03)、榆林市产学研项目、延安大学博士科研启动基金(YD2010-01)

作者简介: 阮兴祥(1988—),男,硕士研究生,主要从事光电子材料方面的研究。E-mail: xingxiangruan@163.com

导师简介: 张威虎(1961—),男,博士,教授,主要从事光电子材料以及太阳能电池方面的研究。

E-mail: ydzwh@163.com

*通信联系人。E-mail: zhangfuchun72@163.com

对于 GaN 半导体材料的研究主要集中在关于 GaN 薄膜的表面吸附及掺杂问题上^[5-6]。杜玉杰等^[7]通过对 GaN(0001)表面的光学特性和体相 GaN 的光学特性进行比照,发现两者有着很大的差别。董位等^[8]使用 ANSYS 软件,计算了以蓝宝石作为衬底的 GaN 薄膜的热应力,并且比较了不同的温度对应力的作用。张洪酥等^[9]利用氮化镓 LED 外延片作为研究对象,为提高发光效率提出了一种增强型 LED 的方案。张韵等^[10]用蓝宝石作为衬底,使用金属有机物化学气相沉积的方法生长出不同厚度的 *c* 面 GaN 薄膜,发现在 3.38 eV 处附近,不同厚度的 GaN 薄膜均出现了吸收截止边。杜晓晴等^[11]采用超高真空激活工艺,对变掺杂 GaN 光电阴极的光谱响应特性进行测试并得出了在反射工作的模式下变掺杂结构的阴极具有更好的长波长紫外响应特性的结论。Masaki Ueno 等^[12]采用 X 射线衍射对纤锌矿结构的 GaN 在 0~60 GPa 的压力下的稳定性进行研究,指出了在 52.2 GPa 下 GaN 从纤锌矿结构转变成岩盐矿结构,并且轴比(*c/a*)的变化并不与其保持一致。

目前关于应力条件下 GaN 的性质研究的相关报道比较少。在本文中 GaN 晶格的形变是使用外加应力的方式来设置的,计算方法采用了密度泛函理论框架下的广义梯度近似(GGA)的平面波超软赝势方法,计算分析了外压调制下 GaN 材料的电子结构与光学属性,并对不同应力下 GaN 材料的晶格形变的结果进行了对比研究,为 GaN 光电子材料的实验研究和开发新的基于 GaN 的光电子器件提供了理论依据。

2 理论模型和计算方法

2.1 理论模型

理想 GaN 晶体是六方纤锌矿结构,属于 P6₃mc 空间群,对称性为 C_{6v-4},晶格常数 $a=b=0.3189$ nm, $c=0.5185$ nm, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$,其中 c/a 为 1.626,比理想的六角密堆积结构的 1.633 稍小^[13]。*c* 轴方向的 Ga—N 键长为 0.1937 nm,其他方向的 Ga—N 键长为 0.1946 nm,其晶胞由 Ga 的六角密堆积和 N 的六角密堆积反向套构而成。GaN 原胞包括 2 个 Ga 原子和 2 个 N 原子,其结构如图 1 所示。

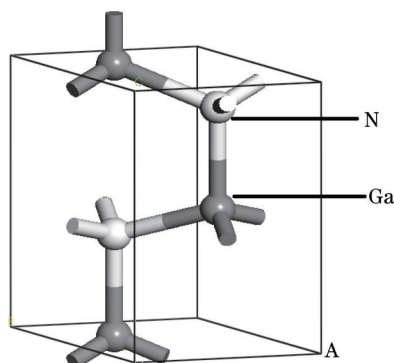


图 1 氮化镓原胞
Fig.1 GaN unit cell

2.2 计算方法

理论计算采用基于密度泛函理论框架下的第一性原理计算方法:利用总能量平面波赝势方法,将离子势用赝势来替换,利用平面波基组的方式来展开电子波函数,使用广义梯度近似(GGA)或局域密度近似(LDA)的方法来校正电子与电子相互作用的交换和相关势函数,这是截止到目前为止比较准确的用来计算电子结构的理论方法^[14]。

在进行计算的过程中使用实验值作为晶格常数,交换关联能由 GGA 进行处理,离子势则是由超软(ultra-soft)赝势取代,几何优化采用 BFGS(Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)算法^[15]。平面波截断能量 $E_{\text{cut}}=330$ eV,迭代过程中的收敛精度为 5×10^{-6} eV,作用在每个原子上的力小于等于 0.1 eV/nm,以 0.02 GPa 作为内应力的收敛标准,在 Brillouin 区中,积分计算时选择 $9 \times 9 \times 6$ 的高对称性的特殊 K 点对全 Brillouin 求和,采用 $20 \times 20 \times 32$ 的算法作为快速傅里叶变换。这些能量的计算均是在倒易空间中进行。

在线性响应的过程中,采用复介电函数 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ 来描述半导体材料的宏观光学属性,其中实部 $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$,虚部 $\varepsilon_2 = 2nk$,反射系数由 n 来表示,消光系数由 k 来表示。利用 Kramers-Kronig 色散关系和

直接跃迁定义,可以推导出晶体的介电函数实部、虚部和吸收系数等相关的结果^[16]。与本文计算有关的内容如下:

$$\varepsilon_1 = 1 + c_2 \sum_{v,c} \int_{BZ} d^3k \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{|e \cdot M_{cv}(k)|^2}{[E_c(k) - E_v(k)] [E_c(k) - E_v(k)]^2 - \hbar^2 \omega^2}, \quad (1)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{c_1}{\omega^2} \sum_{v,c} \int_{BZ} d^3k \frac{2}{(2\pi)^3} |e \cdot M_{cv}(k)|^2 \delta[E_c(k) - E_v(k) - \hbar\omega], \quad (2)$$

$$I_{(\omega)} = \sqrt{2}(\omega) \left[\sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 - \varepsilon_2(\omega)^2} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2}, \quad (3)$$

$$R_{(\omega)} = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}, \quad (4)$$

式中 c 、 v 分别表示导带和价带,第一布里渊区由 BZ 来表示, k 为倒格矢,用 \hbar 来代表普朗克常数,动量跃迁矩阵元为 $|e \cdot M_{cv}(k)|^2$, ω 为角频率, c_1 和 c_2 是常数, $E_c(k)$ 和 $E_v(k)$ 分别表示导带和价带上的本征能级,以上公式为分析晶体的能带结构和光学属性提供了科学依据,它反映了在能级之间电子的跃迁时所产生光谱的发光机理。

3 计算结果与讨论

3.1 GaN 体相计算结果与讨论

为了和外压调制下的 GaN 的计算结果进行比较,首先使用实验值作为晶格参数,计算了理想 GaN 原胞的电子结构,包括能带结构、总体态密度(TDOS)、分波态密度(PDOS)。计算结果如图 2 和图 3 所示。

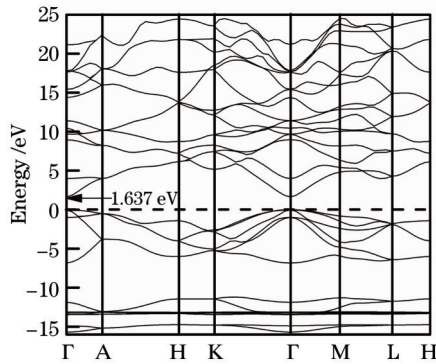


图 2 GaN 晶体能带结构

Fig.2 Calculated band structure of GaN

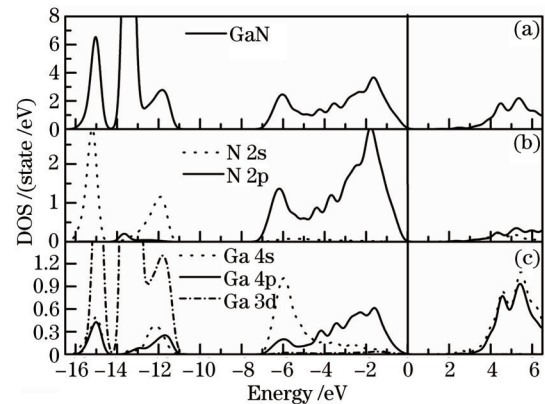


图 3 GaN 的态密度。(a)总体态密度;(b)和(c)分波态密度

Fig.3 DOS of GaN. (a) TDOS; (b) and (c) PDOS

从图 2 和图 3 可以看出, GaN 的价带可以用两个区域进行细分,即下价带区(-16.1~-10.9 eV)和上价带区(-7.4~0.0 eV)。很显然, N 2p 态电子和 Ga 4s 态电子形成 GaN 的上价带区,与此同时,下价带区则主要由 Ga 3d 态电子和 N 2s 态电子贡献。对于导带部分,其主要是由 N 2p 态电子和 Ga 4s、4p 态电子杂化构成的,尤其是在导带底处出现了反键态,这是由 Ga 4s 态电子贡献的。本文虽然采用了 GGA,但计算出来的带隙值($E_g=1.637$ eV)仍然偏小,这是因为对于 GGA 和 LDA 来说,都存在导致 E_g 计算值偏小的普遍情况^[17]。对于 GaN 晶体来说, Ga 3d 态电子的能量在计算的过程中被高估了,导致了 Ga 3d 态电子和 N 2p 态电子之间的相互作用增强,从而引起了价带的带宽增大,带隙偏低。但这并不影响理论上对 GaN 电子特性的分析,特别是对于在 G 点处的能带结构的计算结果与其他机构的研究人员得出的理论值^[18-19]吻合较好。从图 2 中还可以看出 GaN 是一种直接带隙的半导体材料,这是因为导带底和价带顶的位置都位于 Brillouin 区的 G 点处。

3.2 外压调制下 GaN 电子结构计算

以下是在外压(流体等静压力)的调制下,从理论方面来研究 GaN 电子结构的变化规律。计算时使用 Castep 提供的流体静压力的设置方法,在 a 、 b 、 c 等 3 个方向上分别同时施加 5~20 GPa 的压力,分别获得了 GaN 的禁带宽度 E_g 、键长和布局数等。其计算出来的结果列于表 1 中。由表 1 可知,随着压力的增大,带隙变宽。当压

力从 0 GPa 增加到 20 GPa 时,键长分别从 0.1980 nm 和 0.1972 nm 减少到 0.1917 nm 和 0.1911 nm,布局数从 1.74 增加到 1.84,这说明共价性增强,离子性减弱,原子之间的结合更加的紧密,这些与 Masaki Ueno 等^[12]和 Christensen 等^[20]的计算结果一致。

表 1 不同压力下 GaN 带隙、键长、布局数变化

Pressure /GPa	E_g /eV	$d_{\text{Ga1-N}}$ /nm	$d_{\text{Ga2-N}}$ /nm	Population
0	1.637	0.1980	0.1972	1.74
5	1.821	0.1961	0.1954	1.77
10	1.984	0.1945	0.1938	1.79
15	2.132	0.1930	0.1924	1.82
20	2.269	0.1917	0.1911	1.84

不同外压调制下 GaN 的总体态密度的变化如图 4 所示。从表 1 和图 4 中可以看出,应力作用下总体态密度图与体材料 GaN 的态密度图基本一致,主要的态密度峰出现的位置一致。但随着压力的逐渐增大,原子间距变小,Brillouin 区扩大,导致态密度分布趋于稀疏,导带与价带部分态密度分别向高能和低能方向漂移,带隙 E_g 明显被展宽。但从总体来看,在压力的作用下,能带距离费米面越远,它的移动效果就越显著。

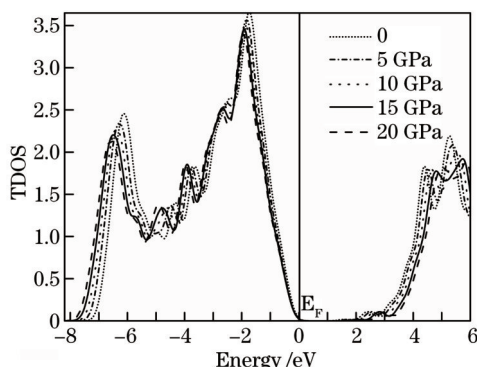


图 4 不同压力作用下 GaN 总体态密度变化趋势

Fig.4 Change trend of TDOS of GaN

3.3 光学性质

3.3.1 复介电函数

图 5 为应力调制下 GaN 的复介电函数实部和虚部。由图 5(a)可知,当压力分别为 0、5、10、15、20 GPa 时,对应的静态介电函数 $\epsilon_1(0)$ 的值依次为 6.13、5.92、5.75、5.62、5.52,其中零压时计算的 $\epsilon_1(0)=6.13$ 与实验数据 5.7 符合得很好^[21]。可见随着压力的逐渐增大,静态介电函数减小。从图中还可以看出,在低能段,介电函数实部 $\epsilon_1(\omega)$ 随着光子能量的增加而上升。在 1.58 eV 处出现第一个峰,随后呈现出略微的下降趋势;在 2.95 eV 处出现微谷,然后 $\epsilon_1(\omega)$ 随着能量的增加而增大,直到 5.09 eV 左右时达到最大值;在 5.09~10.00 eV 的光子能量范围内,随着光子能量的逐渐增加,介电函数的实部明显降低,吸收系数的值显著变大,带间跃迁的电子对光吸收的程度明显增强,反射强度逐渐减弱。随着压力的增大,介电函数实部 $\epsilon_1(\omega)$ 的峰值向高能方向移动,这主要是由压力的增大导致 Burstein-Moss 移动造成的。对于图 5(b)来说,在压力为 0 GPa 时,介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 的吸收边位于 1.6 eV 附近,对应于直接跃迁阈,这是由价带顶电子到导带底电子的跃迁形成的,但是其吸收限较弱;在图 5(b)中,有一个较陡的吸收限于 4.0 eV 附近。由导带和价带的色散曲线可知,在 G 点处,从价带顶简并能级到导带底的电子跃迁的概率很小,不太可能形成如此强的介电峰。从 N 的分波态密度可知,其主要来源于 N 2p(上价带)到未占据导带间的跃迁。在 7.29 eV 和 8.58 eV 附近有两个明显的吸收峰,这两个峰主要是由价带 N 2p 态和导带 Ga_s、4p 态之间的电子跃迁形成的。施加压力后,虚部峰值向高能方向漂移,这是明显的蓝移现象,与 Li 等^[22]所计算得出的现象相一致。从图 5(b)中还可以看出,当压力分别为 0、5、10、15、20 GPa 时,对应的带隙值依次增大。可见当压力增大时, $\epsilon_2(\omega)$ 吸收边向高能方向漂移,这与计算得到的分波态密度的变化一致。因此可知,增加压力对 GaN 光学参数的影响是显而易

见的。

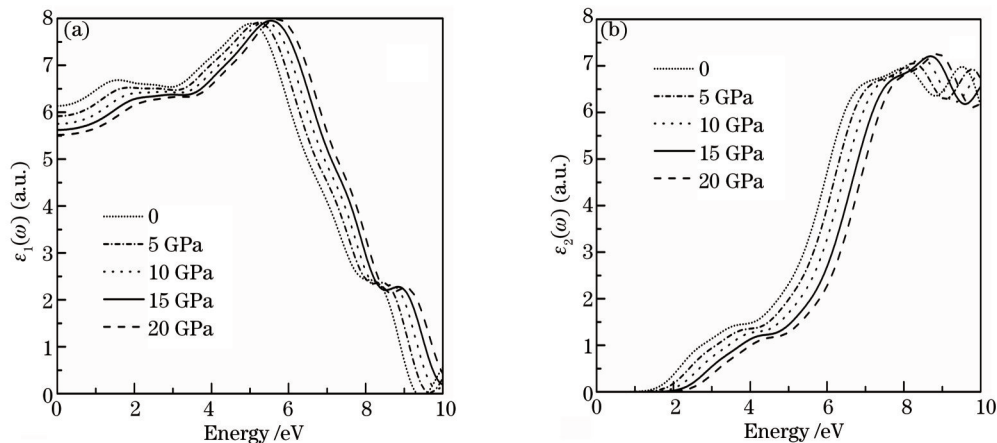


图5 不同压力作用下 GaN 的复介电函数。(a)实部 $\varepsilon_1(\omega)$;(b)虚部 $\varepsilon_2(\omega)$

Fig.5 Complex dielectric function of GaN under different pressures. (a) Real part $\varepsilon_1(\omega)$; (b) imaginary part $\varepsilon_2(\omega)$

3.3.2 吸收谱

图6为不同压力作用下对应的 GaN 吸收谱。由图6可知,在没有压力作用下,吸收边大约从 1.6 eV 开始,表明 GaN 的光学能隙在 1.6 eV 左右,这与能带结构的计算结果 1.637 eV 相符。当压力分别为 0、5、10、15、20 GPa 时,吸收边有向高能方向移动的趋势,当能量在 3.18 eV 附近时,出现第一个吸收峰,这主要是由 N 2p 态从价带顶向导带底跃迁而产生的。从图中还可以看出,不同的压力对应的吸收谱最大峰值分别为 380025、387098、393754、399172 和 403862 时,对应的能量值分别为 11.827、12.070、12.278、12.453、12.618 eV,可见随着压力的增大,对应的峰值明显偏大,说明增大压力可以增加价带电子向导带跃迁的几率,与此同时,电子跃迁时要吸收更多的能量才能完成,所以吸收谱有蓝移趋势。这种现象在 β -FeSi₂ 材料的研究中已经被发现^[23]。

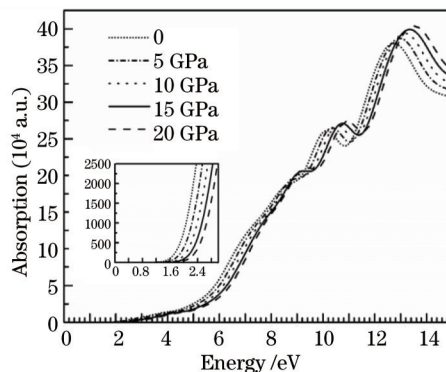


图6 不同压力作用下 GaN 的吸收谱

Fig.6 Absorption spectra of GaN under different pressures

4 结 论

采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波计算方法,对外应力条件下 GaN 的电子结构和光学属性进行了模拟研究。从研究的结果可以看出随着压力的逐渐增大, GaN 的态密度曲线向着背离费米面方向移动,并且 Ga—N 键长变短,布局数增大,共价性增强,带隙展宽,电荷发生重新分布。复介电函数和吸收谱均随着应力的增大逐渐向高能方向移动,产生了蓝移现象。因此可以通过加压的方式,提高 GaN 的光电转换效率。

参 考 文 献

- 1 Xie Changkun, Xu Fajiang, Deng Rui, *et al.*. Studies on electronic structure of GaN(001) surface[J]. Acta Physica Sinica, 2002, 51(11): 2606-2611.

- 谢长坤, 徐法强, 邓 锐, 等. GaN(0001)表面的电子结构研究[J]. 物理学报, 2002, 51(11): 2606-2611.
- 2 Liang liang, Niu Pingjuan, Yu Liyuan. Influence of electron beam irradiation on GaN-based blue LED [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2010, 47(10): 102301.
- 梁 亮, 牛萍娟, 于莉媛. 电子束辐照对 GaN 基蓝光 LED 性能的影响[J]. 激光与光电子学进展, 2010, 47(10): 102301.
- 3 Lang Jiahong, Gu Biao, Xu Yin, *et al.*. The GaN-based semiconductor materials LDs [J]. Laser Technology, 2003, 27(4): 321-324.
- 郎佳红, 顾 彪, 徐 茵, 等. GaN 基材料半导体激光器综述[J]. 激光技术, 2003, 27(4): 321-324.
- 4 Li Yonghua, Xu Pengshou, Pan Haibin, *et al.*. First-principle study on GaN(1010) surface structure[J]. Acta Physica Sinica, 2005, 54(1): 317-322.
- 李拥华, 徐鹏寿, 潘海滨, 等. GaN(1010)表面结构的第一性原理计算[J]. 物理学报, 2005, 54(1): 317-322.
- 5 Xing Haiying, Fan Guanghan, Zhang Yong, *et al.*. First principle study of Mg, Si and Mn co-doped GaN [J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58(1): 450-458.
- 邢海英, 范广涵, 章 勇, 等. 第一性原理研究 Mg, Si 和 Mn 共掺 GaN [J]. 物理学报, 2009, 58(1): 450-458.
- 6 Zhang Yunyan, Fan Guanghan, Zhang Yong, *et al.*. Effect of spectrum-control in dual-wavelength light-emitting diode by doped GaN interval layer [J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(2): 028503.
- 张运炎, 范广涵, 章 勇, 等. 掺杂 GaN 间隔层对双波长发光二极管光谱调控作用的研究[J]. 物理学报, 2011, 60(2): 028503.
- 7 Du Yujie, Chang Benkang, Zhang Junju, *et al.*. First-principles study of the electronic structure and optical properties of GaN(0001) surface [J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(6): 067101.
- 杜玉杰, 常本康, 张俊举, 等. GaN(0001)表面电子结构和光学性质的第一性原理研究[J]. 物理学报, 2012, 61(6): 067101.
- 8 Dong Wei, Zuo Ran, Lai Xiaohui, *et al.*. Simulation of stress in GaN thin film on sapphire [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2013, 50(7): 073101.
- 董 位, 左 然, 赖小慧, 等. 蓝宝石基 GaN 薄膜的热应力模拟分析[J]. 激光与光电子学进展, 2013, 50(7): 073101.
- 9 Zhang Haosu, Zhu Jun, Zhu Zhendong, *et al.*. Bottom-emitting surface-plasmon-enhanced GaN-LED based on the sinusoidal nano-gratings [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2013, 50(4): 042302.
- 张洪酥, 朱 钧, 朱振东, 等. 基于正弦微纳光栅的反射式表面等离激元增强型 GaN-LED [J]. 激光与光电子学进展, 2013, 50(4): 042302.
- 10 Zhang Yun, Xie Zili, Chai Xuzhao, *et al.*. Luminescence property of GaN film with change of thickness [J]. Acta Optica Sinica, 2013, 32(s1): s131004.
- 张 韵, 谢自力, 柴旭朝, 等. 厚度对 GaN 薄膜的发光性能的影响[J]. 光学学报, 2012, 32(s1): s131004.
- 11 Du Xiaoqing, Tian Jian, Chang Benkang. Preparation and photoemission mechanisms of varied-doping GaN photocathode [J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(s1): s104001.
- 杜晓晴, 田 健, 常本康. 变掺杂 GaN 光电阴极的制备及发射机理研究[J]. 光学学报, 2012, 32(s1): s104001.
- 12 Masaki Ueno, Minoru Yoshida, Akifumi Onodera, *et al.*. Stability of the wurtzite-type structure under high pressure: GaN and InN [J]. Phys Rev B, 1994, 49(1): 14-21.
- 13 Perlin P, Jauberthie-carillon C, Itie J P, *et al.*. Raman scattering and X-ray-absorption spectroscopy in gallium under high pressure [J]. Phys Rev B, 1992, 45(1): 83-88.
- 14 Segall M D, Lindan P J D, Probert M J, *et al.*. First-principles simulation: ideas, illustrations and the castep code [J]. J Phys Cond Matt, 2002, 14(11): 2717-2744.
- 15 Fischer T H, Almlöf J. General methods for geometry and wavefunction optimization[J]. Journal of Phys Chem, 1992, 96(24): 9768-9774.
- 16 Shen Xuechu. The Spectrum and Optical Property of Semiconductor [M]. Beijing: Science Press, 1992. 76-94.
- 沈学础. 半导体光谱和光学性质[M]. 北京: 科学出版社, 1992. 76-94.
- 17 W Y Ching, Yongnian Xu, K W Wong. Ground-state and optical properties of Cu₂O and CuO crystals [J]. Phys Rev B, 1998, 40(11): 7684-7695.
- 18 Gao G Y, Yao K L, Liu Z L, *et al.*. Ab initio pseudopotential studies of the pressure dependences of structural, electronic and optical properties for GaN [J]. Solid State Commun, 2006, 138(10): 494-497.
- 19 Stampfl C, Van De Walle C G. Density-functional theory calculations for the III-V nitrides using the local-density approximation and the generalized gradient approximation [J]. Phys Rev B, 1999, 59(8): 5521-5535.
- 20 N E Christensen, I Gorczyca. Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure [J]. Phys Rev B, 1994, 50

- (7): 4397–4415.
- 21 P Perlin, I Gorczyca, N E Christensen, *et al.*. Pressure studies of gallium nitride: crystal growth and fundamental electronic properties [J]. *Phys Rev B*, 1992, 45(23): 13307–13313.
- 22 Li Yingfa, Linghu Rongfeng, Xu Mei. Theoretical study of the electronic structure and optical properties of GaN under high pressure [J]. *Journal of Sichuan Normal University (Natural Science)*, 2013, 36(5): 730–734.
李应发, 令狐荣锋, 徐梅. 高压下 GaN 的电子结构及光学性质的理论研究[J]. *四川师范大学学报(自然科学版)*, 2013, 36(5): 730–734.
- 23 Yan Wanjun, Zhang Chunhong, Gui Fang, *et al.*. Electronic structure and optical properties of stressed β -FeSi₂ [J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(7): 0716001.
闫万珺, 张春红, 桂放, 等. 应力调制下 β -FeSi₂ 电子结构及光学性质[J]. *光学学报*, 2013, 33(7): 0716001.