

# 二维 GaAs 电子结构和光学性质的理论计算

褚玉金, 张晋敏, 高廷红, 田泽安, 梁永超, 陈茜, 黄忠念, 谢泉

贵州大学大数据与信息工程学院, 贵州 贵阳 550025

**摘要** 采用基于密度泛函理论的第一性原理和分子动力学理论, 验证了二维 GaAs 类石墨烯结构的稳定性, 计算了二维 GaAs 的基态电子结构、态密度和光学性质参数。结果表明, 不同于三维 GaAs, 二维 GaAs 最高的两个能带相互交叠, 显示出金属性; 维度的降低使得 As 的 s 态和 p 态电子相互作用增强, 产生较多的态密度峰, 且峰位向低能方向移动; 低能带主要由 Ga-d 态、As-s 态和 As-p 态构成; 高能带主要由 As-s 态和 As-p 态构成; 二维 GaAs 静态介电常数为 3.67, 对紫外光具有较强的吸收作用, 在光子能量 3.90~4.71 eV 和 5.69~6.90 eV 范围表现出金属反射特性。

**关键词** 材料; 纳米材料; 二维 GaAs; 第一性原理; 电子结构; 光学性质

**中图分类号** O481.1; O482.3; O471.5; O472.3

**文献标识码** A

**doi:** 10.3788/LOP55.041601

## Theoretical Calculation of Electronic Structure and Optical Properties of Two-Dimensional GaAs

Chu Yujin, Zhang Jinmin, Gao Tinghong, Tian Zean, Liang Yongchao,

Chen Qian, Huang Zhongnian, Xie Quan

*College of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang, Guizhou 550025, China*

**Abstract** The stability of two-dimensional (2D) graphene-like GaAs is theoretically verified by the first-principles method based on the density functional theory (DFT) and the molecular dynamics (MD). The energy band structure, density of states (DOS), and parameters for describing optical properties of 2D GaAs are calculated. The results show that, two-dimensional GaAs is different from three-dimensional GaAs, and it shows a metallic property because the two highest bands are overlapping. The dimension reduction results in the enhancement of the interaction among electrons in s and d states of As. More DOS peaks occur with peak position shifts towards a low energy direction. The lower energy bands are composed of Ga-d, As-s and As-p states, and the higher energy bands are composed of As-s and As-p states. The 2D GaAs has a static permittivity of 3.67, and has a strong absorption for ultraviolet light. It shows a metallic reflection characteristic in the photon energy ranges of 3.90-4.71 eV and 5.69-6.90 eV.

**Key words** materials; nanomaterials; two-dimensional GaAs; first principle; electronic structure; optical properties

**OCIS codes** 160.4236; 160.6000; 160.4760

**收稿日期:** 2017-08-21; **收到修改稿日期:** 2017-10-10

**基金项目:** 国家自然科学基金(61264004)、贵州省教育厅"125"重大科技专项项目(黔教合重大专项字[2012]003)、贵州省高层次创新型人才培养项目(黔科合人才[2015]4015)、贵州省科技合作计划项目(黔科合 LH 字[2015]7218)、贵州大学研究生重点课程(贵大研 ZDKC[2015]026)、贵州大学研究生创新基金(研理工[2017]017)

**作者简介:** 褚玉金(1992—), 男, 硕士研究生, 主要从事二维 GaAs 材料理论方面的研究。

E-mail: chuyujin12306@163.com

**导师简介:** 张晋敏(1963—), 女, 教授, 博士生导师, 主要从事光电子材料与器件方面的研究。

E-mail: jmzhang@gzu.edu.cn(通信联系人)

## 1 引言

2004年,Novoselov等<sup>[1]</sup>利用微机械剥离法从石墨中分离出石墨烯。此后,二维材料得到了学者的广泛研究。蜂窝状结构的石墨烯可以实现宽吸收<sup>[2]</sup>,并具有强度高、韧性强<sup>[3]</sup>和热导率高<sup>[4]</sup>等特点,可用于制作电子器件散热器、处理器等。但其零带隙的结构特点限制了该材料在光学器件制备及开关操作方面的应用。二维砷烯、锑烯及氧化物材料<sup>[5-7]</sup>避开了零带隙结构特点,拓宽了二维材料的应用范围。过渡金属硫化物与石墨烯结合形成的有机-无机异质结<sup>[8]</sup>,高性能中红外脉冲光纤激光器二维材料的开发<sup>[9]</sup>以及通过掺杂和引入缺陷等方法提高二维过渡金属硫化物(TMDs)光致发光量子产率<sup>[10]</sup>的研究等推动了二维材料发展。

石墨烯主体结构由碳元素相互键连构成,具有拓扑绝缘特性,同样具有拓扑绝缘特性的 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ <sup>[11]</sup>等拓扑绝缘体也具有相同结构。此外,以 $\text{MoS}_2$ <sup>[12]</sup>为代表的类石墨烯结构TMDs所含金属元素为同族, $\text{WS}_2$ <sup>[13]</sup>等也具有类似结构。三维GaAs具有闪锌矿结构,与碳元素形成的金刚石结构相似。对三维GaAs的研究主要集中在能带结构<sup>[14]</sup>、缺陷形成能<sup>[15]</sup>、纳米团簇结构<sup>[16]</sup>、材料生长过程中微观结构的演变规律<sup>[17]</sup>以及相变<sup>[18]</sup>等方面,而二维结构下该材料的光电性质和几何结构的研究鲜有报道。因此,对二维类石墨烯GaAs的结构与性质进行理论模拟与计算具有重要意义。本文采用基于密度泛函理论的第一性原理和分子动力学理论方法,研究了二维GaAs的能带结构、电子态密度和光学性质,该研究为实验制备二维GaAs材料提供了参考。

## 2 计算方法和理论描述

### 2.1 物理模型及算法

从石墨烯结构出发,根据Ga-As键的键长 $2.37 \times 10^{-10} \text{ m}$ ,设置类石墨烯结构GaAs晶格常数为 $a = b = 4.20 \times 10^{-10} \text{ m}$ , $c = 20 \times 10^{-10} \text{ m}$ ,构建 $16 \times 16 \times 1$ 的超胞结构模型。在 $c$ 方向添加厚度为 $20 \times 10^{-10} \text{ m}$ 的真空层,层与层之间无相互作用,并选取单层结构进行计算分析,单层体系中包含512个原子。图1(a)给出了模型的部分结构( $2 \times 2 \times 1$ ),其中蓝球为Ga原子,黄球为As原子。所有的计算工作采用CASTEP软件包完成,它是基于密度泛函平面波超软赝势的量子力学程序<sup>[19]</sup>。利用Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno算法<sup>[20-23]</sup>对模型进行结构优化:采用广义梯度近似下的Perdew-Burke-Ernzerh交换相关能泛函描述交换-关联效应<sup>[24]</sup>,截断能设置为300 eV,相应的自洽场收敛精度为 $10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{atom}^{-1}$ ,赝势选取Ultrasoft赝势。优化之后的结果显示,类石墨烯结构二维GaAs材料整体上无不规则变化,晶格常数变为 $a = b = 4.13 \times 10^{-10} \text{ m}$ 。

为进一步验证结构稳定性,利用分子动力学方法对该结构继续进行优化,优化之前结构如图1(b)所示。体系包含10368个原子,其中5184个Ga原子,5184个As原子。选择等温等压(NPT)系综,周期性边界条件为:在300 K温度条件下弛豫 $6 \times 10^6$ 步,时间步长1 fs,势函数选用tersoff势<sup>[25-26]</sup>。弛豫结果显示,结构平面向凹凸变化,晶格常数的变化处于 $0 \sim 0.10 \times 10^{-10} \text{ m}$ 范围,二维GaAs类石墨烯结构模型稳定。

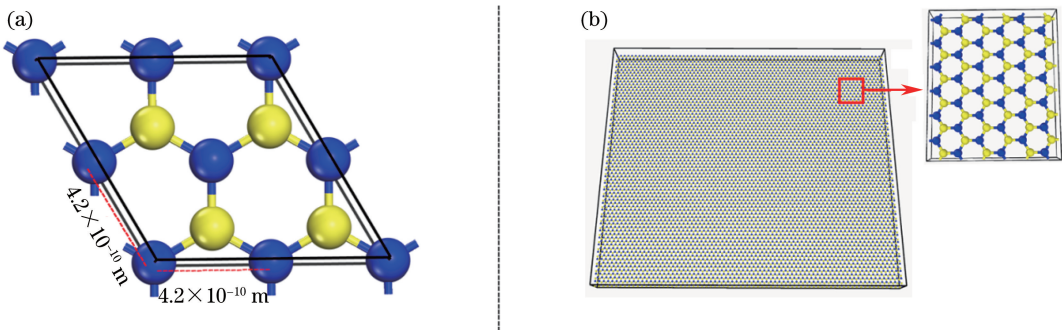


图1 二维平面GaAs类石墨烯结构。(a)第一性原理计算模型;(b)分子动力学模型

Fig. 1 Graphene-like structure of two-dimensional (2D) GaAs.

(a) Model in first-principle calculation; (b) model in molecular dynamics

### 2.2 光学性质理论描述

在线性响应范围内,固体的宏观光学响应函数

通常可由光的复介电函数或复折射率描述,即

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega), \quad (1)$$

$$N(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega), \quad (2)$$

式中  $\epsilon(\omega)$  为复介电函数,  $N$  为复折射率,  $\omega$  为光的角频率, 介电函数实部  $\epsilon_1 = n^2 - \kappa^2$ , 虚部  $\epsilon_2 = 2n\kappa$ ,  $n$  为折射率,  $\kappa$  为消光系数。

采用描述金属光学性质的德鲁德色散理论, 它将电子之间的相互作用理解为碰撞或散射过程, 其大小可用阻尼系数  $\gamma$  表示。根据该色散关系可以推导出晶体介电函数虚部和实部、吸收系数  $\alpha$ 、反射率  $R(\omega)$  以及能量损失函数  $L(\omega)$  等, 并可对光学性质进行分析<sup>[27-28]</sup>。相关的理论公式为

$$\epsilon_2(\omega) = \chi_i(\omega) = \frac{\omega_p^2 \gamma}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (3)$$

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \chi_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (4)$$

$$\alpha \equiv \frac{2\omega\kappa}{c_0} = \frac{4\pi\kappa}{\lambda_0}, \quad (5)$$

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2}, \quad (6)$$

$$L(\omega) = \text{Im} \left[ -\frac{1}{\epsilon(\omega)} \right] = \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)}, \quad (7)$$

式中  $\chi_i$  为电极化率的虚部,  $\chi_r$  为电极化率的实部,  $\omega_p$  为材料的等离子体频率,  $c_0$ 、 $\lambda_0$  分别为真空中光的传播速度和波长。

## 3 计算结果与讨论

### 3.1 声子谱

图 2 所示为二维类石墨烯结构 GaAs 声子谱的计算曲线。由于二维类石墨烯结构 GaAs 原胞中包含 2 个原子, 理论上该晶体共有 6 支色散关系, 即应有 6 条声子谱。图 2 的计算结果与理论分析一致。从图 2 中可看出, 频率负值范围未出现格波, 即材料未出现虚频, 表明二维类石墨烯 GaAs 模型结构稳定。图 2 中频率较小的三条曲线为声学支格波, 频率较大的三条曲线为光学支格波。声学波反映的是

原胞质心的振动, 而光学波反映的是原胞中原子间的相对振动。在声学支格波中, 频率较大的一支为纵声学波, 频率较小的两支为横声学波。

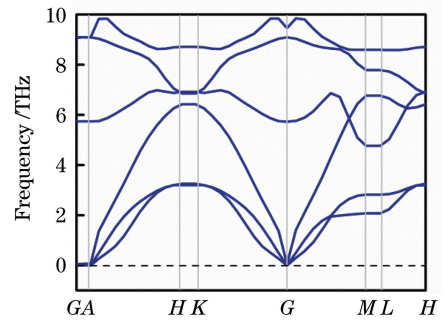


图 2 二维 GaAs 声子谱曲线

Fig. 2 Phonon spectral curves of 2D GaAs

### 3.2 能带结构

图 3 分别给出了二维与三维 GaAs 费米面附近的能带结构, 其中图 3(a) 中红线表示最低能带, 绿线表示最高能带; 图 3(b) 中红线表示导带底, 绿线表示价带顶。三维闪锌矿 GaAs 能带采用广义梯度近似方法计算, 结果显示, 禁带宽度为 0.65 eV, 三维闪锌矿 GaAs 属于直接带隙半导体, 此计算结果与宿磊等<sup>[29-32]</sup>的理论计算结果一致。表 1 所示为二维 GaAs 在各个高对称点处的能量值, 其中  $E_1$  为能量最小值,  $E_2$  为能量最大值。从表 1 可发现, 与三维 GaAs 能带结构相比, 二维 GaAs 能量在能带的 G 点达到最小值 -0.24 eV, 在低能带的 H 点达到最大值 0.07 eV, 两能带交叠, 二维 GaAs 显示出金属特性, 导电能力强于三维 GaAs 的。类石墨烯 GaAs 与具有相同结构的 h-BN、MoS<sub>2</sub>、BC<sub>2</sub>N 等半导体二维材料相比, 电子输运能力较强, 在制备导电器件方面具有优势。表 2 给出了 h-BN、MoS<sub>2</sub>、BC<sub>2</sub>N 二维材料电子结构和光学性质方面的参数, 其中  $\alpha_{\max}$  为对应材料的最大吸收系数,  $R_{\max}$  为对应材料的最大反射率。

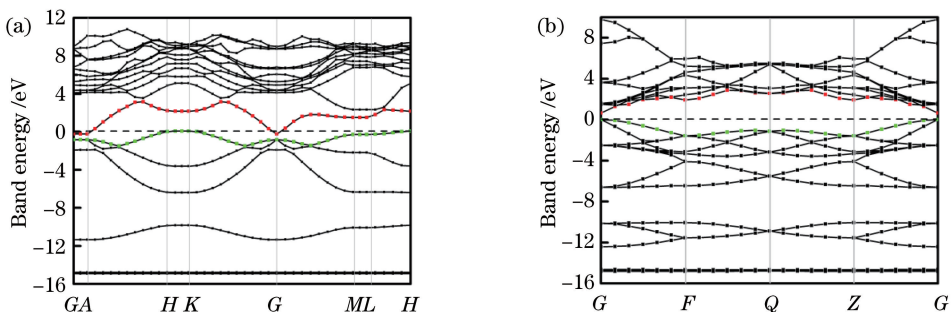


图 3 能带结构图。(a) 二维 GaAs; (b) 三维 GaAs

Fig. 3 Energy band structure. (a) 2D GaAs; (b) 3D GaAs

表 1 二维 GaAs 布里渊区中高对称点的能量值

Table 1 Energy value of highly symmetric point in 2D GaAs Brillouin zone

Point	G	A	H	K	M	L
$E_1$ /eV	-0.24	0.33	2.17	2.43	1.53	1.82
$E_2$ /eV	-0.84	-0.89	0.07	-0.16	-0.38	-0.26

表 2 h-BN、MoS<sub>2</sub>、BC<sub>2</sub>N 的参数Table 2 Parameters of h-BN, MoS<sub>2</sub> and BC<sub>2</sub>N

Two-dimensional material	Permittivity	Band gap /eV	Absorbed energy /eV	$\alpha_{\max}$ /cm <sup>-1</sup>	$R_{\max}$
h-BN	4.9	4.42	4.21-7.63	114677	52%
MoS <sub>2</sub>	4.3	1.8	1.55-8.00	80000	5%
BC <sub>2</sub> N	5.0	0	4.35-22.12	510000	50%

图 4 所示为态密度计算结果,二维 GaAs 与三维 GaAs 相比,相同能量范围内的电子态相同。在能量 -16~-12 eV 范围内,GaAs 主要是由 Ga 的 3d 态构成,As 的 s 态贡献很小;在 -12~0 eV 范围内,主要由

As 的 4s 态和 4p 态构成;在能量大于 0 eV 的范围内,二维 GaAs 主要由 As 的 4s 态和 4p 态杂化构成。可见高能带主要由 As 的 s 态和 p 态杂化构成,低能带主要由 Ga 的 d 态,As 的 s 态和 p 态杂化构成。

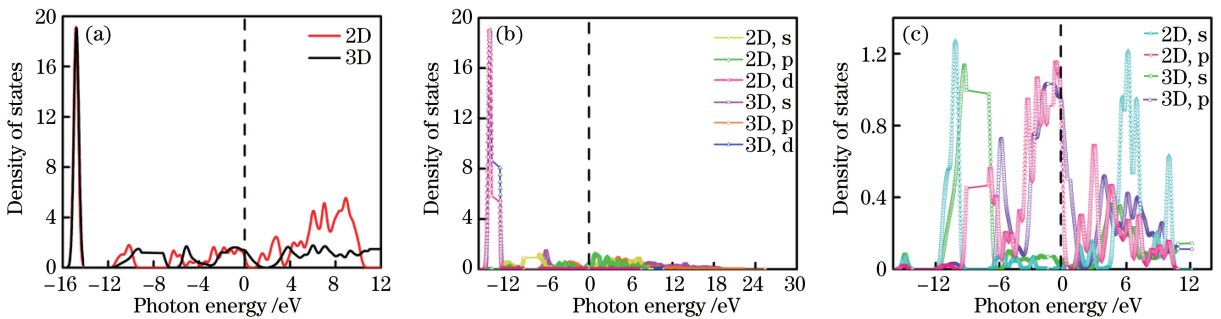


图 4 (a)二维和三维 GaAs 的总态密度;(b)Ga 的分波态密度图;(c)As 的分波态密度图  
Fig. 4 (a) Total density of states of 2D and 3D GaAs ; (b) partial density of states of Ga;  
(c) partial density of states of As

二维 GaAs 与三维 GaAs 相比,高能带内能态密集,能带宽度相对较窄,从图 4 可知,随着维度的降低,量子尺寸效应逐渐出现,As 的 4s 态与 4p 态相互作用增强,产生的态密度峰值增大,并且峰位向低能量方向移动;在低能带内,As-4s、As-4p 态产生较多的峰,且峰变得尖锐,峰位向高能量方向移动,因此会出现能带交叠现象。同时,这也是二维 GaAs 显示金属性的原因。

分析图 4(a)态密度发现,在 -16 eV 能量处,态密度的峰值相对较大,能带非常平缓。由于能带的形成与能级的分裂叠加有关<sup>[33]</sup>,原子之间结合形成晶体时,电子的相互作用由最外层电子逐渐向里扩展,导致 Ga 的 d 态电子参与能级的分裂,分裂的能级由低能量态逐渐向高能量态发展,形成能带。高能量态 4~12 eV 态密度峰跨度较大,相应的带宽较宽,As 的 s 态、p 态电子离域性很强,离域性的电子对材料的导电性也有一定的贡献。

### 3.3 光学性质

#### 3.3.1 GaAs 复介电函数和光谱

介电函数可以反映固体能带结构及其他光谱信息。图 5 给出了二维和三维 GaAs 介电函数实部与虚部随入射光子能量的变化关系,图 6 所示是相应 GaAs 的吸收谱与反射谱。从图 5 可以发现,两者介电函数的虚部变化趋势相似。二维 GaAs 在低能带内介电函数的实部随入射光子能量的增大而增大,在能量 1.97 eV 时达到最大值,超过该能量值的介电函数实部随入射光子能量迅速减小,与反射谱图 6(b)中反射峰所对应的能量相近。二维 GaAs 在 3.90~4.71 eV 和 5.69~6.90 eV 能量范围内的介电函数实部表现为负值,反射谱中对应的能量范围内出现两个反射率分别为 26%和 30%的峰,说明此能量范围内的光子在二维 GaAs 中的传播几率很小,即 GaAs 对紫外光呈现金属反射特性。计算得到的二维 GaAs 静态介电常数为  $\epsilon_1(0)=3.67$ ,三维 GaAs 静态介电常数为 18.00。介电函数虚部对应四



个较强的吸收峰,对应的光子能量分别为 4.43, 1.20, 1.55, 0.33 eV。由于材料具有金属特性,光子的吸收

主要对应电子由低能态向高能态的跃迁过程。

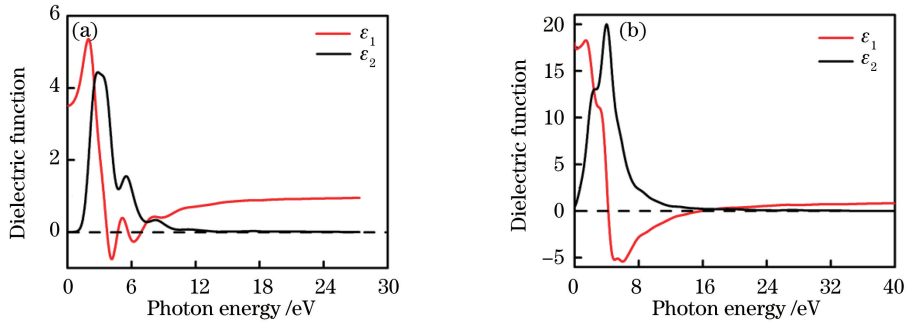


图 5 复介电函数。(a)二维 GaAs;(b)三维 GaAs

Fig. 5 Complex dielectric function. (a) 2D GaAs; (b) 3D GaAs

此外,从图 6 中可以看出,与三维 GaAs 相比,二维 GaAs 的吸收峰较多,但对光的吸收能力较低。吸收率随入射光子能量的增大而增大,在 3.98 eV 时,达到最大值。在可见光和红外光区,材料的吸收系数很小,反射率约为 10%,尤其在能量小于 0.15 eV 以及能量大于 26.92 eV 范围内时,吸收系

数为零,表明二维 GaAs 体系是透明的,入射光可以穿透 GaAs 体系。分析 GaAs 吸收谱发现,存在 5 个较强的吸收峰,对应的能量分别为 3.88, 5.96, 8.38, 11.39, 17.46 eV,可见该材料吸收峰和反射峰均处于紫外光区,因此可被用来制作紫外光屏蔽或紫外探测器装置<sup>[34]</sup>。

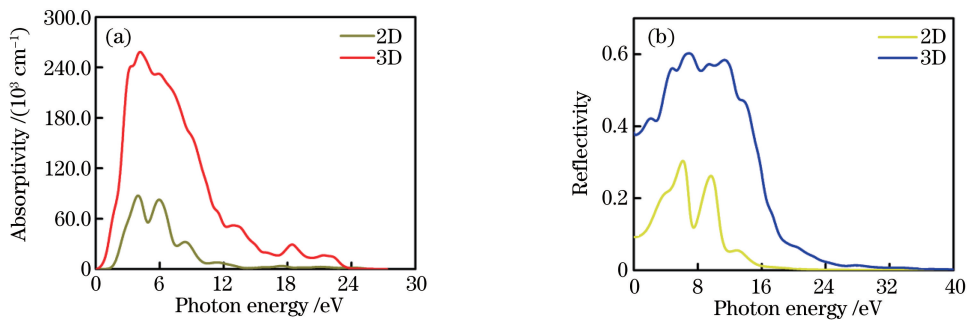


图 6 二维和三维 GaAs 的(a)吸收谱与(b)反射谱

Fig. 6 (a) Absorption and (b) reflection spectra of 2D and 3D GaAs

### 3.3.2 GaAs 能量损失谱

能量损失谱描述电子在通过均匀电介质时的能量损耗情况,能量损失光谱中的峰值是物质由金属性到介电性的过渡点,对应于体系的等离子体频率  $\omega_p$ <sup>[35]</sup>。图 7 给出了二维和三维 GaAs 的能量损失谱,从图 7 中可以发现,二维 GaAs 在 7.07 eV 时的损失函数达到峰值,此值即为等离子体频率  $\omega_p$ ,而三维 GaAs 在 16.0 eV 达到峰值。当入射光子能量小于  $\omega_p$  时,二维 GaAs 体系表现出金属反射特性,对应于反射谱中最大反射率所在的能量范围;当入射光子能量大于  $\omega_p$  时,体系表现为透明,对应于吸收谱中吸收系数减小的能量范围。能量小于 0.15 eV 和大于 26.94 eV 时, GaAs 的电子能量损失为零,体系表现出一定的透明性,与吸收谱吸收系数趋于零,反射谱反射率极小的能量范围相对应。

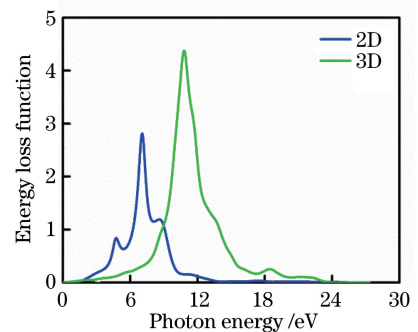


图 7 二维和三维 GaAs 的能量损失函数谱

Fig. 7 Energy loss function spectra of 2D and 3D GaAs

## 4 总结

利用基于密度泛函理论的平面波方法和分子动力学理论方法,研究了二维 GaAs 的声子谱、能带结

构、电子态密度和光学性质。研究发现,二维 GaAs 与石墨烯在结构上具有相似性,声子谱显示二维类石墨烯 GaAs 无虚频出现,模型稳定。与三维 GaAs 相比,二维 GaAs 能带交叠,具有金属特性,导电能力显著增强,出现上述现象主要是因为维度的降低使得 As 的 s 态和 p 态电子的相互作用增强,态密度峰向低能带与高能带范围移动;低能带主要由 Ga 的 d 态,As 的 s 态和 p 态构成,高能带主要由 As 的 s 态和 p 态构成。

光学性质的计算结果表明,二维 GaAs 静态介电常数为 3.67,介电函数虚部存在四个吸收峰,对于金属而言,电子的跃迁主要是带内跃迁;在 3.90~4.71 eV 和 5.69~6.90 eV 能量范围内,对紫外光表现出金属反射特性,材料在特定能量范围内对紫外光具有一定的吸收与反射作用,可用来制作光存储器件,也可用来制作紫外光屏蔽或紫外探测器装置。

### 参 考 文 献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films [J]. *Science*, 2004, 306(5696): 666-669.
- [2] Liu M, Yin X, Ulin-Avila E, *et al.* A graphene-based broadband optical modulator [J]. *Nature*, 2011, 474(7349): 64-67.
- [3] Dutta S, Pati S K. Half-metallicity in undoped and boron doped graphene nanoribbons in the presence of semilocal exchange-correlation interactions [J]. *The Journal of Physical Chemistry*, 2008, 112(5): 1333-1335.
- [4] Song C L, Sun B, Wang Y L, *et al.* Charge-transfer-induced cesium superlattices on graphene[J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108(15): 156803.
- [5] Zhang S, Yan Z, Li Y, *et al.* Atomically thin arsenene and antimonene: Semimetal-semiconductor and indirect-direct band-gap transitions [J]. *Angewandte Chemie*, 2015, 127(10): 3155-3158.
- [6] Zhang S, Zhou W, Ma Y, *et al.* Antimonene oxides: Emerging tunable direct bandgap semiconductor and novel topological insulator [J]. *Nano Letters*, 2017, 17: 3434-3440.
- [7] Zhang S, Xie M, Li F, *et al.* Semiconducting group 15 monolayers: A broad range of band gaps and high carrier mobilities[J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2016, 55(5): 1666-1669.
- [8] Li H F, Liang T, Xie S, *et al.* Fluorescence property of two-dimensional materials/PTCDA heterojunctions[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2017, 44(7): 0703011.
- [9] 李洪飞, 梁涛, 谢爽, 等. 二维材料/PTCDA 异质结荧光性能[J]. *中国激光*, 2017, 44(7): 0703011.
- [9] Wei C, Shi H X, Luo H Y, *et al.* Research progress of pulsed mid-infrared fiber laser using two-dimensional materials[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2017, 44(7): 0703009.
- [9] 韦晨, 史红霞, 罗鸿禹, 等. 基于二维材料调制的中红外脉冲光纤激光器的研究进展 [J]. *中国激光*, 2017, 44(7): 0703009.
- [10] Zheng T, Nan H Y, Wu Z T, *et al.* Laser emission on two-dimensional transition metal dichalcogenides [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2017, 54(4): 040003.
- [10] 郑婷, 南海燕, 吴章婷, 等. 二维过渡金属硫属化合物的激光发射 [J]. *激光与光电子学进展*, 2017, 54(4): 040003.
- [11] Guo B, Yao Y, Yang Y F, *et al.* Dual-wavelength rectangular pulse erbium-doped fiber laser based on topological insulator saturable absorber[J]. *Photonics Research*, 2015, 3(3): 94-99.
- [12] Li Y. Electrical and optoelectronic properties of MoS<sub>2</sub>, WSe<sub>2</sub> and related heterostructures [D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2016.
- [12] 李洋. MoS<sub>2</sub>, WSe<sub>2</sub> 二维材料及相关异质结的电学与光电性质[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2016.
- [13] Guo B, Lü Q, Yao Y, *et al.* Direct generation of dip-type sidebands from WS<sub>2</sub> mode-locked fiber laser[J]. *Optical Materials Express*, 2016, 6(8): 2475-2486.
- [14] Zhang Q M, Chiarotti G, Selloni A, *et al.* Atomic structure and bonding in liquid GaAs from *ab-initio* molecular dynamics [J]. *Physical Review B*, 1990, 42(8): 5071-5081.
- [15] Schick J T, Morgan C G, Papoulias P. First-principles study of As interstitials in GaAs: Convergence, relaxation, and formation energy [J]. *Physical Review B*, 2002, 66(19): 195302.
- [16] Zhang D L, Xu Y L, Zhang J B, *et al.* First-principles study of the electronic transport properties in (GaAs)<sub>n</sub> (n = 2-4) nanocluster-based molecular junctions[J]. *Physics Letters A*, 2012, 376(45): 3272-3276.
- [17] Kratzer P, Penev E, Scheffler M. First-principles studies of kinetics in epitaxial growth of III-V semiconductors [J]. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 2002, 75(1): 79-88.
- [18] Rino J P, Chatterjee A, Ebbsjö I, *et al.* Pressure-

- induced structural transformation in GaAs: A molecular-dynamics study [J]. *Physical Review B*, 2002, 65(19): 195206.
- [19] Clark S J, Segall M D, Pickard C J, *et al.* First principles methods using CASTEP [J]. *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*, 2005, 220(5/6): 567-570.
- [20] Broyden C G. The convergence of a class of double-rank minimization algorithms 1. General considerations [J]. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 1970, 6(1): 76-90.
- [21] Fletcher R. A new approach to variable metric algorithms [J]. *The Computer Journal*, 1970, 13(3): 317-322.
- [22] Goldfarb D. A family of variable-metric methods derived by variational means [J]. *Mathematics of Computation*, 1970, 24(109): 23-26.
- [23] Shanno D F. Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization [J]. *Mathematics of Computation*, 1970, 24(111): 647-656.
- [24] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77(18): 3865-3868.
- [25] Tersoff J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties [J]. *Physical Review B*, 1988, 38(14): 9902-9905.
- [26] Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems [J]. *Physical Review B*, 1989, 39 (8): 5566-5568.
- [27] Fang R C. *Solid spectroscopy* [M]. Hefei: China Science and Technology University Press, 2001: 71-75.  
方容川. *固体光谱学* [M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2001: 71-75.
- [28] Shen X C. *Semiconductor spectroscopy and optical properties* [M]. Beijing: Science Press, 2002: 76-94.  
沈学础. *半导体光谱和光学性质* [M]. 北京: 科学出版社, 2002: 76-94.
- [29] Su L, Wang X D, Yao M. The first principles study on electronic and optical properties of Sb-doped zinc blende GaAs [J]. *Material Review*, 2012, 26(18): 142-147.  
宿磊, 王旭东, 姚曼. Sb 掺杂闪锌矿 GaAs 电子结构和光学性质第一性原理研究 [J]. *材料导报*, 2012, 26(18): 142-147.
- [30] Chen Q S. The first principles study of GaAs' s optical properties and electricity properties [D]. Xi'an: Xidian University, 2010.  
陈启桑. GaAs 材料光电性质第一性原理研究 [D]. 西安: 西安电子科技大学, 2010.
- [31] Huang R Q. A first-principles study of the electronic, optical and magnetic properties of N substitution in GaAs [D]. Zhengzhou: Zhengzhou University, 2015.  
黄瑞琪. 掺杂 N 对 GaAs 电子、光学和磁学性质影响第一性原理研究 [D]. 郑州: 郑州大学, 2015.
- [32] Yan Y, Wang Q, Shu W, *et al.* First-principle study of the electronic and optical properties of BInGaAs quaternary alloy lattice-matched to GaAs [J]. *Physica B: Condensed Matter*, 2012, 407(23): 4570-4573.
- [33] Seeger K. *Semiconductor physics* [M]. New York: Springer Science & Business Media, 2013.
- [34] Chen D, Xiao H Y, Jia W, *et al.* Electronic structures and optical properties of  $AAl_2C_4$  ( $A = \text{Zn}, \text{Cd}, \text{Hg}$ ;  $C = \text{S}, \text{Se}$ ) semiconductors [J]. *Acta Physica Sinica*, 2012, 61(12): 127103.  
陈懂, 肖河阳, 加伟, 等. 半导体材料  $AAl_2C_4$  ( $A = \text{Zn}, \text{Cd}, \text{Hg}$ ;  $C = \text{S}, \text{Se}$ ) 的电子结构和光学性质 [J]. *物理学报*, 2012, 61(12): 127103.
- [35] Saniz R, Ye L H, Shishidou T, *et al.* Structural, electronic, and optical properties of  $\text{NiAl}_3$ : First-principles calculations [J]. *Physical Review B*, 2006, 74(1): 014209.