

稀土(La, Y)掺杂 Ca_2Si 的电子结构及光学性质

邓永荣^{1,3*}, 闫万珺^{1,3}, 覃信茂^{1,3}, 张春红^{2,3}, 周士芸^{1,3}

¹安顺学院电子与信息工程学院, 贵州 安顺 561000;

²安顺学院数理学院, 贵州 安顺 561000;

³安顺学院航空电子电气与信息网络工程中心, 贵州 安顺 561000

摘要 基于第一性原理计算了稀土元素 La、Y 分别掺杂和共掺杂 Ca_2Si 的几何结构、能带结构、电子态密度及光学性质。计算结果表明, La 单掺杂和 La/Y 共掺杂使得 Ca_2Si 晶胞体积增大, 带隙变窄, 而 Y 掺杂后晶胞体积减小, 带隙变宽。La、Y 单掺杂和共掺杂后费米能级进入导带, Ca_2Si 变为 n 型半导体, Ca_2Si 的介电函数、消光系数和吸收边均向低能方向移动, 折射率和反射率均增大。

关键词 材料; Ca_2Si ; 稀土元素; 第一性原理; 电子结构; 光学特性

中图分类号 O474; O881.1

文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP55.091601

Electronic Structure and Optical Properties of Rare-Earth Element (La, Y) Doped Ca_2Si

Deng Yongrong^{1,3*}, Yan Wanjun^{1,3}, Qin Xinmao^{1,3}, Zhang Chunhong^{2,3}, Zhou Shiyun^{1,3}

¹ School of Electronic and Information Engineering, Anshun University, Anshun, Guizhou 561000, China;

² School of Mathematics and Physics, Anshun University, Anshun, Guizhou 561000, China;

³ Engineering Center of Avionics Electrical and Information Network, Anshun University, Anshun, Guizhou 561000, China

Abstract The geometric structure, energy band structure, density of electronic state, and optical properties of rare-earth elements La, Y single-doped and co-doped Ca_2Si are calculated by the first principles. The calculation results show that, the La single doping and La/Y codoping make the cell volume of Ca_2Si increase and the bandgap become narrow, while the Y doping does make the cell volume decrease and the bandgap become wide. After the La, Y single doping and codoping, the Fermi level enters the conduction band, and Ca_2Si becomes an n-type semiconductor, and the dielectric function, extinction coefficient, and absorption edge of Ca_2Si all move towards the low energy direction, and both the refractivity and reflectivity increase.

Key words materials; Ca_2Si ; rare earth element; first principles; electronic structure; optical properties

OCIS codes 160.4760; 160.2100; 160.6000

1 引言

Ca_2Si 是一种直接带隙碱土金属硅化物, 具有使用寿命长、可循环利用、对地球无污染等特点, 是一种新型的环境友好型半导体材料。 Ca_2Si 与现有硅基技术有良好的兼容性, 具有优异的电学特性和光学特性。当能量小于 4.5 eV 时, Ca_2Si 的光吸收

系数大于 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的^[1], 因此有望成为制造太阳能电池的一种候选材料。电阻测量等实验研究表明, Ca_2Si 是制备发光二极管和半导体激光器的理想材料, 可用于光电子器件、集成电路等领域, 因此其受到越来越多研究者的关注。

掺杂是调控材料性能的重要手段之一, 通过掺杂可以调制材料的电子结构, 改变半导体的导电类

收稿日期: 2018-01-05; 修回日期: 2018-03-28; 录用日期: 2018-04-02

基金项目: 贵州省科学技术厅、安顺市人民政府、安顺学院联合科技基金项目(黔科合 LH 字[2014]7507)、贵州省教育厅创新群体重大项目(黔教合 KY 字[2016]048 号)、安顺学院创新团队资助课题(2015PT02)

* E-mail: dyr19870620@163.com

型,从而改变材料的光学性能,得到电子结构和光学性质更优异的光电材料。稀土金属具有独特的最外层电子结构,因而表现出独特的物理和化学性质,研究稀土元素掺杂对材料物理性能的影响已成为近年来掺杂研究的重点之一。近年来,对稀土元素掺杂的发光材料的研究主要集中在以 Eu 为掺杂原子的体系^[2-4]、以 La、Y 为掺杂原子的体系和以 Ce 为掺杂原子的体系等^[5-11]。而大多数对掺杂 Ca_2Si 的研究是针对块体 Ca_2Si 和 Ca_2Si 薄膜材料制备的研究。通过分析 Ca_2Si 掺杂改性的研究报道发现,对 Ca_2Si 掺杂能有效改善其光学性质。丰云等^[12-15]对 K、Sc、P 分别掺杂 Ca_2Si 的电子结构及光学性质进行了研究,发现掺入 Sc、P 后正交相 Ca_2Si 形成了 n 型半导体,K 掺入后正交相和立方相 Ca_2Si 都形成了 p 型半导体,光学性质发生改变。段兴凯等^[16]发现,随着 Sn 浓度的变化, Ca_2Si 的电导率和热导率都得到明显的改善。目前,关于稀土元素掺杂 Ca_2Si 的研究主要集中于 Sc 掺杂。鉴于此,本文采用第一性原理计算方法,对稀土元素 La、Y 分别掺杂及共掺杂 Ca_2Si 的光电性质进行了研究,分析了 La、Y 杂质元素对 Ca_2Si 光电性质改变的机理,为研究稀土元素掺杂 Ca_2Si 提供了参考。

2 模型与方法

正交相 Ca_2Si 的晶格常数 $a = 0.7667 \text{ nm}$, $b = 0.4779 \text{ nm}$, $c = 0.9002 \text{ nm}$ ^[17],每个原胞有 8 个 Ca 原子和 4 个 Si 原子。计算中使用的 Ca_2Si 超晶胞共有 48 个原子,是在 Ca_2Si 原胞的 A、B 基矢方向分别扩展一个单胞得到的 $2 \times 2 \times 1$ 超晶胞。由于 Ca 原子有两个不等价的位置(Ca I 位和 Ca II 位),单独掺杂时用 1 个 La 或 Y 原子替代 Ca I 位或 Ca II 位原子得到 La 或 Y 单独掺杂 Ca_2Si 的计算模型。La/Y 共掺杂时,用 La、Y 原子同时替代单掺杂计算所得到的稳定位的 Ca 原子,得到 La/Y 共掺杂的计算模型。图 1 所示为 Ca_2Si 结构模型。

为了保证计算结果具有较好的收敛性,首先进行截断能与 k 点收敛测试。这里选取 310 eV 截断能进行 k 点测试, k 点测试从 $1 \times 1 \times 1$ 开始,当 k 点取样为 $3 \times 3 \times 3$ 时,总能量已开始收敛。为选取更高的 k 点密度,计算时 k 点取样为 $5 \times 5 \times 5$ 。平面波截断能的测试从 100 eV 开始,每次增加 100 eV,计算结果表明,当平面波截断能为 500 eV 时,总能量已经达到收敛要求。收敛性的测试结果如图 2 所示。

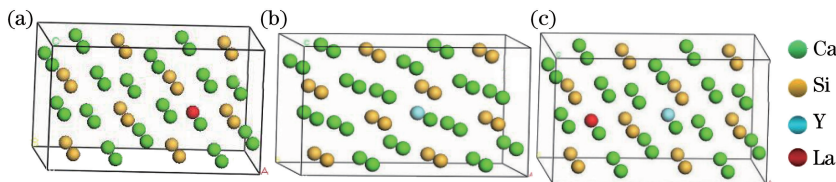


图 1 Ca_2Si 结构模型。(a) La 掺杂 Ca II 位;(b) Y 掺杂 Ca I 位;(c) La/Y 共掺杂

Fig. 1 Structural diagram of Ca_2Si . (a) La-doped Ca II site; (b) Y-doped Ca I site; (c) La/Y codoped

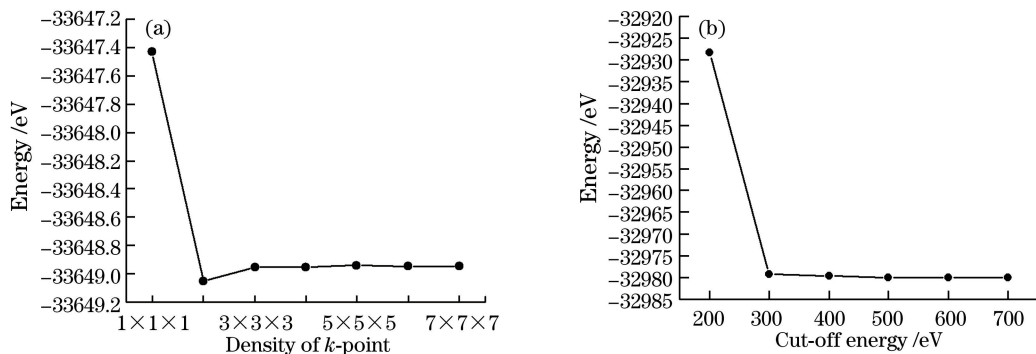


图 2 Ca_2Si 收敛性测试。(a) k 点;(b)截断能

Fig. 2 Convergence test of Ca_2Si . (a) k -point; (b) cut-off energy

所有计算由 CASTEP 软件包^[18]来完成,首先用 BFGS 算法对晶格常数进行优化,在优化过程中,自洽迭代收敛精度设置为 $1.0 \times 10^{-5} \text{ eV/atom}$,作

用在每个原子上的力不大于 0.3 eV/nm ,原子之间的内应力不大于 0.05 GPa 。交换关联势采用的是广义梯度近似(GGA),用超软赝势^[19]处理离子实与

电子之间的相互作用。在总能量和电荷密度计算中,平面波的截断能为 500 eV,迭代收敛精度为 5×10^{-6} eV/atom,布里渊区积分采 $5 \times 5 \times 5$ 的 Monkhorst-Pack 形式^[20]的高对称特殊 k 点方法。计算过程中选取的价电子组态分别为 Ca 的 $4s^2$ 、Si 的 $3s^2 3p^2$ 、La 的 $5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$ 和 Y 的 $4s^2 4p^6 4d^1 5s^2$,其中 s、p、d 为电子组态。

3 结果与分析

3.1 几何结构

表 1 所示为优化后 La、Y 掺杂 Ca_2Si 的晶格常数及总能量。由表 1 可以看出,由于 Ca_2Si 的 Ca I 位和 Ca II 位不等价,La 原子取代 Ca I 位的 Ca 原子后, a 减小, b 、 c 增大;取代 Ca II 位的 Ca 原子后, a 、

b 、 c 都增大,晶胞体积 v 增大,这是因为 La 的共价半径(180 pm)大于 Ca 的共价半径(171 pm)。Y 原子取代 Ca I 位的 Ca 原子后, a 、 b 略微增大, c 减小;取代 Ca II 位的 Ca 原子后, a 、 b 、 c 均减小,晶胞体积减小,这是由于 Y 的共价半径(163 pm)小于 Ca 的共价半径(171 pm),与 Si 成键的键长较短。从总能量来看,掺入稀土原子后,体系稳定时的能量较未掺杂的 Ca_2Si 体系能量有所升高。La 掺入 Ca I 位的能量高于掺入 Ca II 位的能量,Y 掺入 Ca I 位的能量低于掺入 Ca II 位的能量,因此 La 掺杂时,Ca II 位为稳定位,Y 掺杂时,Ca I 位为稳定位。以下电子结构及光学性质的计算以及 La/Y 共掺入 Ca_2Si 时,都选择的是 La 置换 Ca II 位、Y 置换 Ca I 位。

表 1 掺杂前后 Ca_2Si 的晶格常数及总能量

Table 1 Lattice constants and total energies of Ca_2Si before and after doping

Sample	$2a$ /nm	$2b$ /nm	c /nm	v /nm ³	Total energy /eV
Undoped Ca_2Si (experiment)	1.5334	0.9598	0.9002	1.3248	-
Undoped Ca_2Si (calculation)	1.5299	0.9592	0.9081	1.3326	-33788.85
La-doped Ca_2Si (Ca I)	1.5269	0.9623	0.9115	1.3392	-33649.3742
La-doped Ca_2Si (Ca II)	1.5318	0.9596	0.9103	1.3380	-33649.5228
Y-doped Ca_2Si (Ca I)	1.5310	0.9599	0.9065	1.3321	-32980.1819
Y-doped Ca_2Si (Ca II)	1.5221	0.9590	0.9096	1.3277	-32979.9496
La/Y-codoped Ca_2Si	1.5314	0.9593	0.9096	1.3362	-32840.9751

3.2 能带结构和态密度

图 3 所示为未掺杂 Ca_2Si 及 La、Y 掺杂 Ca_2Si 的能带结构图。由于能带结构的性质主要由费米能级附近的能带决定,因此图 3 只给出了 $-1.5 \sim 1.5$ eV 范

围的能带结构,且以费米能级为能量零点。从图 3(a) 可知, Ca_2Si 的价带顶和导带底都位于 Γ 点。因此 Ca_2Si 为直接带隙半导体,带隙宽度为 0.352 eV,与 Imai 等^[21] 计算得到的 0.36 eV 较为接近,但与实验带

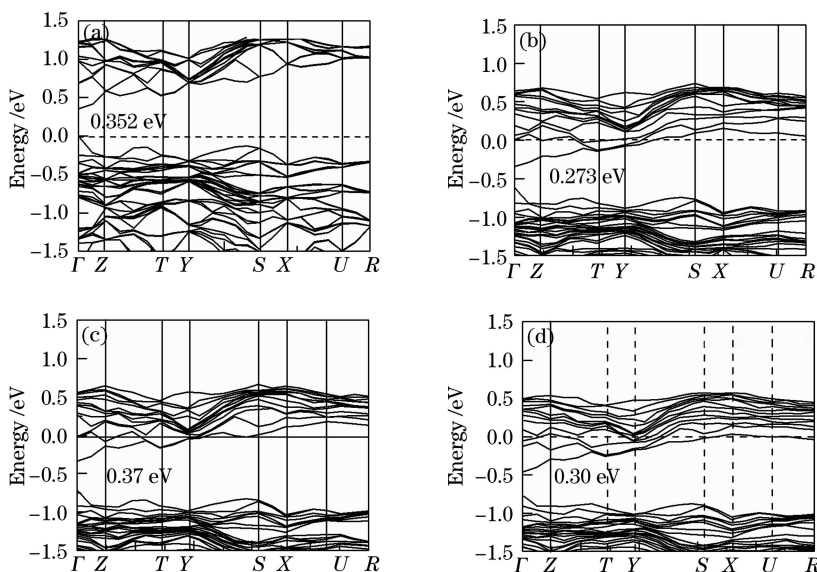


图 3 Ca_2Si 的能带结构。(a)未掺杂;(b) La 掺杂;(c) Y 掺杂;(d) La/Y 共掺杂

Fig. 3 Energy band structures of Ca_2Si . (a) Undoped; (b) La doped; (c) Y doped; (d) La/Y codoped

隙值 1.9 eV 相差 1.548 eV, 这是密度泛函的估计误差导致的^[22-23], 理论计算与实验之间的误差不影响对 Ca_2Si 电子结构及相关性质的理论分析。

由图 3 可知, 与未掺杂 Ca_2Si 相比, La、Y 原子掺入后, 导带下移且数目增多, 费米能级向导带偏移并插在导带中间, 这是因为稀土元素的掺入使得导电载流子的数目增多, 导带底基本已被电子占据, 这表明 La、Y 掺杂 Ca_2Si 是一种 n 型掺杂。由图 3(b)~(d) 可知, La、Y 掺入后, Ca_2Si 的带隙发生明显变化。La 掺入后, 带隙变为 0.273 eV; Y 掺入后, 带隙变为 0.37 eV; La/Y 共掺后, 带隙变为 0.30 eV。La 及 La/Y 共掺后带隙变窄, Y 单掺后带隙变宽。

图 4 所示为 La、Y 原子掺杂前后 Ca_2Si 总态密度和分波态密度图。由图 4(a) 可知, 在 $-7.10 \sim -5.84$ eV 的能量范围内, Ca_2Si 的态密度主要是由 Si 的 3s 态电子贡献, Ca 的 4s 态和 3d 态电子贡献较小; 在价带顶, Ca_2Si 的态密度主要是由 Si 的 3p

态电子和 Ca 的 3d 态电子贡献, Ca 的 4s 态电子贡献较少; 在导带底, Ca_2Si 的态密度主要是由 Ca 的 3d 态电子贡献, Ca 的 4s 和 Si 的 3p 态电子贡献较少。由图 4(b)~(d) 可知, La、Y 原子掺杂后, 导带和价带均下移, 费米能级进入导带, 导电类型为 n 型, 这是稀土原子的掺入使导电载流子增多引起的。由图 4(b) 可知, 与未掺杂的 Ca_2Si 态密度相比, La 掺入后, 上导带 ($0 \sim 0.77$ eV) 部分态密度结构出现变窄的现象, 局域性增强, 这主要是 La 的 5d 态电子影响所致; 下价带 ($-3.37 \sim 0$ eV) 部分态密度结构出现展宽, 局域性减弱, 这主要受 La 的 5d 态电子影响, 5p 态与 6s 态电子也有较小的贡献。图 4(c) 所示为 Y 掺杂的 Ca_2Si 的态密度图, 这与 La 掺杂情况一致, 不同点仅在于 La 的 d 态电子在导带和下价带的贡献稍大于 Y 的 d 态电子贡献。图 4(d) 所示为 La/Y 共掺杂 Ca_2Si 的态密度图, 可以看出, 仍存在导带变窄、价带部分展宽的现象, La 和 Y 的电子态密度与单掺情况相同。

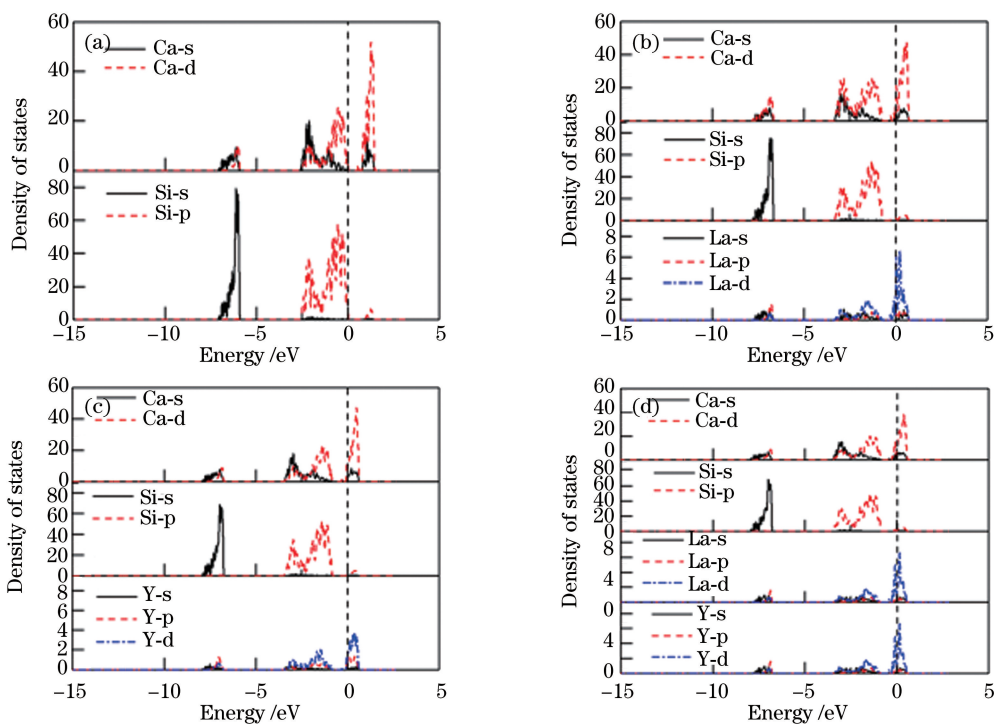


图 4 Ca_2Si 的态密度图。(a) 未掺杂; (b) La 掺杂; (c) Y 掺杂; (d) La/Y 共掺杂

Fig. 4 Density of state of Ca_2Si . (a) Undoped; (b) La doped; (b) Y doped; (d) La/Y codoped

3.3 光学性质

光学性质是半导体材料的重要性质, 固体宏观光学响应函数可以通过复介电函数 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 得到, 其中介电函数实部 $\epsilon_1 = n^2 - k'^2$, 介电函数虚部 $\epsilon_2 = 2nk'$, n 为折射率, k' 为倒格矢大小, ω 为角频率, 根据 Kramers-Kroing 色散关系及直接跃迁概率的定义, 可以推导出介电函数实部 $\epsilon_1(\omega)$ 以

及吸收系数、折射率、反射系数等, 具体推导过程不再赘述。

图 5 所示为 La、Y 原子掺杂后 Ca_2Si 的介电函数。可以看出, La、Y 原子掺杂前后介电函数的变化趋势相似, 介电函数向低能方向偏移, 这可能是因为 La、Y 原子掺入后, 在费米面处出现了大量的导电电子, 改变了电子在带间的跃迁。这与图 3、4 所

示的结果一致。

从图 5(a)可以看出, Ca_2Si 的静态介电常数 $\epsilon_1(0) = 10.49$ eV, 掺 La 后 $\epsilon_1(0) = 15.27$ eV, 掺 Y 后 $\epsilon_1(0) = 11.49$ eV, La/Y 共掺后 $\epsilon_1(0) = 17.84$ eV, 掺杂后 Ca_2Si 的静态介电常数明显增大。静态介电常数 $\epsilon_1(0)$ 越大, 意味着掺杂后该物质具有较大的折射系数, 这与图 6(a) 所示结果一致。由于介电函数的虚部反映能级之间的电子跃迁, 从图 5(b) 可以看出, 未掺杂 Ca_2Si 介电函数虚部在光子能量为 1.64 eV 处产生主要介电峰。这是 Si 的 3p

态和 Ca 的 3d 态电子之间的光学跃迁引起的。La、Y 原子掺杂后, ϵ_2 向低能方向偏移, La 掺杂的影响比 Y 掺杂的影响大, 共掺时偏移最大。这是由于 La、Y 原子的掺入提供了大量的导电电子, 游离态的电子极易被极化^[5], 且 La 的 5d 态电子贡献要比 Y 的 5d 态电子贡献大。掺杂后虚部介电峰值是由 Si 的 3p 态和 Ca 的 3d 态电子以及 La 的 d-d 态电子和 Y 的 d-d 态电子之间的光学跃迁引起的, La、Y 的 d-d 态电子跃迁使得掺杂后虚部介电峰峰值略微增大。

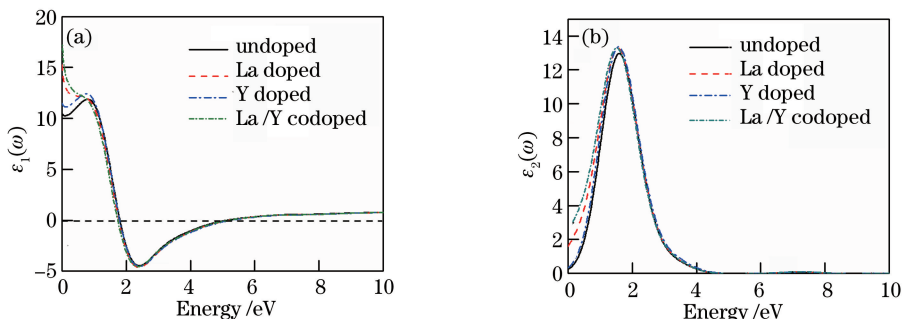


图 5 Ca_2Si 的介电函数。(a) $\epsilon_1(\omega)$; (b) $\epsilon_2(\omega)$

Fig. 5 Dielectric function of Ca_2Si . (a) $\epsilon_1(\omega)$; (b) $\epsilon_2(\omega)$

图 6(a)、(b) 所示为 La、Y 原子掺杂 Ca_2Si 的复折射率, 图 6(c) 所示为吸收系数, 图 6(d) 所示为反射谱。由图 6(a) 可知, Ca_2Si 的折射率 $n_0 = 3.239$, 折射率 n 的主要峰值出现在 $0 \sim 1.5$ eV 范围内, 在 0.99 eV 处出现最大峰值 (3.54), 到达最大峰后, 随

着能量的增加, 折率先减小后增大。

掺杂稀土元素 La、Y 后 n_0 均增大, 其值分别为 3.914 和 3.390; La/Y 共掺时, $n_0 = 4.234$ 。Y 掺入后 n 的主要峰值仍出现在在 $0 \sim 1.5$ eV 范围内, 但掺 La 和 La/Y 共掺时, 最大值出现在 0 eV 处。由

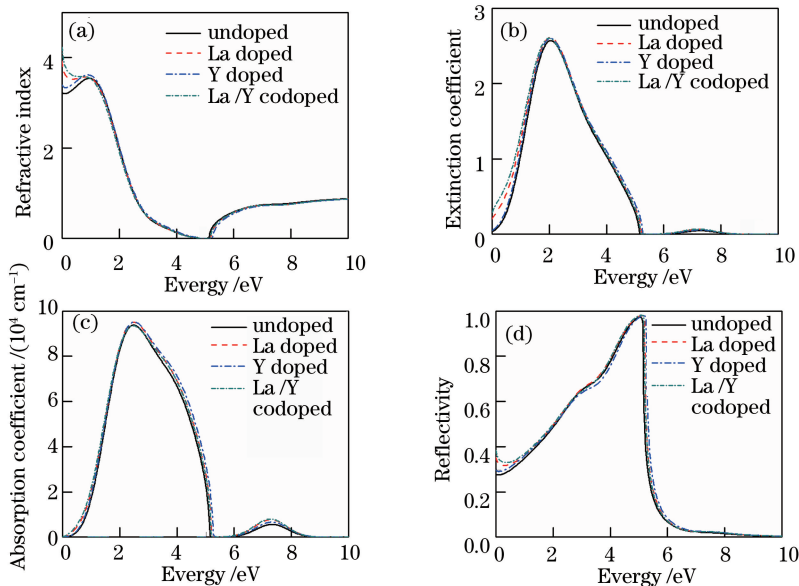


图 6 Ca_2Si 的光学性质。(a) 折射率; (b) 消光系数; (c) 吸收系数; (d) 反射谱

Fig. 6 Optical properties of Ca_2Si . (a) Refractive index; (b) extinction coefficient;

(c) absorption coefficient; (d) reflection spectra

图 6(b)可知, Ca_2Si 消光系数在能量值为 2.047 eV 处出现最大值, 为 2.569。最大峰值出现之后, 消光系数随能量的增加而减小, 当能量为 10.06 eV 时, 消光系数为 0。掺杂稀土元素 La、Y 后消光系数的变化趋势与未掺杂的 Ca_2Si 的变化趋势一致, 且向低能端移动。消光系数的变化趋势与介电函数的变化趋势一致。

由图 6(c)可知, Ca_2Si 的吸收系数的范围为 0~10.03 eV 和 20.15~25.73 eV, 掺杂稀土元素 La、Y 的 Ca_2Si 吸收系数变化趋势相似, 吸收边略微向低能方向偏移。 Ca_2Si 的主吸收峰位于 2.494 eV 处, 峰值为 93783.4 cm^{-1} , 单独掺入 La、Y 原子的主吸收峰位置几乎不变, 峰值略微增大。吸收峰主要来源于激发态的价带电子向导带跃迁的过程, 吸收峰值的增大表明稀土的掺入增强了这种跃迁过程。这主要是 La、Y 的 d 态电子跃迁到导带底引起的。

由图 6(d)可知, 掺杂前后 Ca_2Si 的反射谱变化趋势相似。 Ca_2Si 的主峰在 5.046 eV 处, 反射率为 97.27%。掺杂后主峰位置稍向高能方向移动, 反射率增大, 说明掺杂后 Ca_2Si 的金属反射特性增强。

4 结 论

采用第一性原理方法研究了 La、Y 原子掺杂 Ca_2Si 的几何结构、能带结构、电子态密度及光学性质。几何结构的计算结果表明, La 掺入后晶胞体积增大, Y 掺入后晶胞体积减小, 共掺时, 晶胞体积增大。电子结构的计算结果表明, 稀土 La 和 La/Y 共掺杂后带隙变窄, 费米能级进入导带, 而 Y 掺入后带隙变宽, 费米能级仍进入导带, 表明 La、Y 掺杂及 La/Y 共掺杂 Ca_2Si 是一种 n 型掺杂。光学性质的结果表明, La、Y 掺杂后, Ca_2Si 的介电函数、消光系数和吸收边向低能方向移动, 折射率和反射率增大。掺杂方式对 Ca_2Si 电子结构和光学性质的影响规律相似。

参 考 文 献

- [1] Ivanenko L I, Shaposhnikov V L, Filonov A B, *et al.* Electronic properties of semiconducting silicides: Fundamentals and recent predictions[J]. *Thin Solid Films*, 2004, 461(1): 141-147.
- [2] Elhouichet H, Othman L, Moadhen A, *et al.* Enhanced photoluminescence of Tb^{3+} and Eu^{3+} induced by energy transfer from SnO_2 and Si nanocrystallites[J]. *Materials Science and Engineering: B*, 2003, 105(1/2/3): 8-11.

- [3] Nelson J A, Brant E L, Wagner M J. Nanocrystalline $\text{Y}_2\text{O}_3 \cdot \text{Eu}$ phosphors prepared by alkali reduction[J]. *Chemistry of Materials*, 2003, 15(3): 688-693.
- [4] Xin H, Ma R Z, Wang L Z, *et al.* Photoluminescence properties of lamellar aggregates of titania nanosheets accommodating rare earth ions[J]. *Applied Physics Letters*, 2004, 85(18): 4187-4189.
- [5] Wu L L, Wu Y S, Zou K, *et al.* Photoluminescent properties of La and Ce doped ZnO nanocrystals[J]. *Chinese Journal of Luminescence*, 2008, 29(3): 523-526.
吴莉莉, 吴佑实, 邹科, 等. La、Ce 掺杂 ZnO 纳米晶的发光特性[J]. *发光学报*, 2008, 29(3): 523-526.
- [6] Ding Y C, Xiang A P, Xu M, *et al.* Electrical structures and optical properties of doped earth element (Y, La) in $\gamma\text{-Si}_3\text{N}_4$ [J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, 56(10): 5996-6002.
丁迎春, 向安平, 徐明, 等. 掺稀土元素(Y, La)的 $\gamma\text{-Si}_3\text{N}_4$ 的电子结构和光学性质[J]. *物理学报*, 2008, 56(10): 5996-6002.
- [7] Wu Y X, Hu Z X, Gu S L, *et al.* Electronic structure and optical properties of rare earth element (Y, La) doped in ZnO[J]. *Acta Physica Sinica*, 2011, 60(1): 017101.
吴玉喜, 胡智向, 顾书林, 等. 稀土元素(Y, La)掺杂 ZnO 的电子结构和光学性质[J]. *物理学报*, 2011, 60(1): 017101.
- [8] Zhang C H, Zhang Z Z, Deng Y R, *et al.* First principle study on electronic structure and optical properties of $\beta\text{-FeSi}_2$ with doping rare earth (Y, Ce)[J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(1): 0116001.
张春红, 张忠政, 邓永荣, 等. 稀土(Y, Ce)掺杂 $\beta\text{-FeSi}_2$ 光电性质的第一性原理研究[J]. *光学学报*, 2015, 35(1): 0116001.
- [9] Li Q Q, Hao Q Y, Li Y, *et al.* Theory study of rare earth (Ce, Pr) doped GaN in electronic structure and optical property[J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(1): 017103.
李倩倩, 郝秋艳, 李英, 等. 稀土元素(Ce, Pr)掺杂 GaN 的电子结构和光学性质的理论研究[J]. *物理学报*, 2013, 62(1): 017103.
- [10] Li H L, Zhang Z, Lü Y B, *et al.* First principles study on the electronic and optical properties of ZnO doped with rare earth[J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(4): 047101.
李泓霖, 张仲, 吕英波, 等. 第一性原理研究稀土掺杂 ZnO 结构的光电性质[J]. *物理学报*, 2013, 62

- (4): 047101.
- [11] Zhang C H, Zhang Z Z, Yan W J, *et al.* Study on photoelectric properties of β -FeSi₂ doped with Er[J]. Journal of Sichuan University (Natural Science Edition), 2016, 53(6): 1335-1339.
张春红, 张忠政, 闫万珺, 等. 稀土 Er 掺杂 β -FeSi₂ 光电特性研究[J]. 四川大学学报(自然科学版), 2016, 53(6): 1335-1339.
- [12] Feng Y, Xie Q, Gao R, *et al.* Study on the electronic structure and optical properties of K-doped cubic Ca₂Si[J]. Nanoscience & Nanotechnology, 2012, 9(1): 1-6.
丰云, 谢泉, 高冉, 等. K 掺杂立方相 Ca₂Si 电子结构及光学性能的研究[J]. 纳米科技, 2012, 9(1): 1-6.
- [13] Feng Y, Xie Q, Gao R, *et al.* First-principles calculation of electronic structure and optical properties of K-doped orthorhombic Ca₂Si[J]. Transactions of Materials and Heat Treatment, 2012, 33(9): 155-160.
丰云, 谢泉, 高冉, 等. K 掺杂正交相 Ca₂Si 电子结构和光学性质的第一性原理计算[J]. 材料热处理学报, 2012, 33(9): 155-160.
- [14] Ran Y Z, Gao R, Huang P, *et al.* First-principles of electronic structure and optical properties for Sc-doped orthorhombic Ca₂Si [J]. Chinese Journal of Spectroscopy Laboratory, 2012, 29(6): 3500-3507.
冉耀宗, 高冉, 黄浦, 等. Sc 掺杂正交相 Ca₂Si 电子结构及光学性质的第一性原理[J]. 光谱实验室, 2012, 29(6): 3500-3507.
- [15] Cen W F, Yang Y Y, Fan M H, *et al.* Electronic structure and optical properties of orthorhombic P-doped Ca₂Si calculated by the first-principles [J]. Acta Photonica Sinica, 2014, 43(8): 0816003.
岑伟富, 杨吟野, 范梦慧, 等. P 掺杂正交相 Ca₂Si 电子结构及光学性质的第一性原理计算[J]. 光子学报, 2014, 43(8): 0816003.
- [16] Duan X K, Jiang Y Z, Hu K G, *et al.* Effects of Sn-doping on thermoelectric properties of Ca₂Si-based semiconductor[J]. Journal of Functional Materials, 2017, 48(5): 5122-5126.
段兴凯, 江跃珍, 胡孔刚, 等. Sn 掺杂对 Ca₂Si 基半导体材料热电性能的影响[J]. 功能材料, 2017, 48(5): 5122-5126.
- [17] Takagi N, Sato Y, Matsuyama T, *et al.* Growth and structural properties of Mg₂Si and Ca₂Si bulk crystals [J]. Applied Surface Science, 2005, 244 (1/2/3/4): 330-333.
- [18] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J, *et al.* First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, 14(11): 2717-2744.
- [19] Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism[J]. Physical Review B, 1990, 41(11): 7892-7895.
- [20] Pack J D, Monkhorst H J. "Special points for Brillouin-zone integrations"——a reply[J]. Physical Review B, 1977, 16(4): 1748-1749.
- [21] Imai Y, Watanabe A. Energetics of alkaline-earth metal silicides calculated using a first-principle pseudo potential method[J]. Intermetallics, 2002, 10(4): 333-341.
- [22] Li X, Fan M H, Yang Y F, *et al.* First-principles study on optical properties of N-Co co-doped anatase TiO₂ [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017, 54(12): 121604.
李鑫, 范梦慧, 杨云飞, 等. N-Co 共掺锐钛矿相 TiO₂ 光学性质的第一性原理研究[J]. 激光与光电子学进展, 2017, 54(12): 121604.
- [23] Cui H W, Zhang F C, Shao T T. First-principles study on electronic structure and optical properties of Sn-doped ZnO[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(7): 0716002.
崔红卫, 张富春, 邵婷婷. Sn 掺杂 ZnO 电子结构与光学性质的第一性原理研究[J]. 光学学报, 2016, 36(7): 0716002.