

文章编号: 0253-2239(2009)01-0229-07

掺杂 Mg_2Si 电子结构及光学性质的第一性原理计算

陈茜^{1,2} 谢泉^{1,2} 杨创华^{1,2} 赵凤娟^{1,2}

(¹ 贵州大学理学院, 贵州 贵阳 550025; ² 贵州大学新型光电子材料与技术研究所, 贵州 贵阳 550025)

摘要 采用基于密度泛函理论的第一性原理赝势平面波方法系统计算了 Mg_2Si 及掺 Ag、Al 的能带结构、态密度和光学性质。计算结果表明, 未掺杂 Mg_2Si 属于间接带隙半导体, 禁带宽度为 0.2994 eV, 其价带主要由 Si 的 3p 及 Mg 的 3s、3p 态电子构成, 导带主要由 Mg 的 3s、3p 及 Si 的 3p 态电子构成, 静态介电常数为 18.89, 折射率为 4.3460。掺 Ag 后 Mg_2Si 为 p 型半导体, 价带主要由 Si 的 3p, Mg 的 3s、3p 及 Ag 的 3p、4d、5s 态电子构成, 静态介电常数为 11.01, 折射率为 3.3175。掺 Al 后 Mg_2Si 为 n 型半导体, 导带主要由 Mg 的 3s、3p, Si 的 3p 及 Al 的 3p 态电子构成, Al 的 3s 态电子贡献相对较小, 静态介电常数为 87.03, 折射率为 9.3289。通过掺杂有效调制了 Mg_2Si 的电子结构, 计算结果为 Mg_2Si 光电材料的设计与应用提供了理论依据。

关键词 光学材料; Mg_2Si ; 光学性质; 电子结构; 掺杂; 第一性原理

中图分类号 O474; O481.1; O472⁺.3 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS20092901.0229

First-Principles Calculation of Electronic Structure and Optical Properties of Mg_2Si with Doping

Chen Qian^{1,2} Xie Quan^{1,2} Yang Chuanghua^{1,2} Zhao Fengjuan^{1,2}

¹ College of Science, Guizhou University, Guiyang, Guizhou 550025, China

² Institute of New Type Optoelectronic Materials and Technology, Guizhou University, Guiyang, Guizhou 550025, China

Abstract The energy band structures, density of states and optical properties of Mg_2Si and Ag, Al-doped Mg_2Si have been calculated systemically by first-principles pseudopotential method based on density functional theory (DFT). The calculated results show that Mg_2Si is an indirect semiconductor with the band gap of 0.2994 eV, the valence bands of Mg_2Si are composed of Si 3p, Mg 3s, 3p, the conduction bands are mainly composed of Mg 3s, 3p as well as Si 3p, the static dielectric function is 18.89, and the refractive index is 4.3460. Ag-doped Mg_2Si sample is p-type, the valence bands are composed of Si 3p, Mg 3s, 3p and Ag 3p, 4d and 5s, static dielectric function is 11.01, and the refractive index is 3.3175 after doping Ag. Al-doped Mg_2Si sample is n-type, the conduction bands are composed of Mg 3s, 3p, Si 3p, and Al 3p, the static dielectric function is 87.03, and the refractive index is 9.3289 after doping Al. The electronic structure of Mg_2Si can be modulated effectively by doping. The results offer theoretical data for the design and application of optoelectronic materials of Mg_2Si .

Key words optical materials; Mg_2Si ; optical properties; electronic structure; doping; first principles

1 引 言

Mg_2Si 地层蕴藏量大, 无毒无污染, 是一种新型环境半导体材料^[1], 可以在 Si 基片上外延生长, 和传统的 Si 工艺兼容。在光电子器件、电子器件、能量器件领域具有重要的应用前景。

关于半导体材料及其掺杂的研究一直是材料研究的热点问题。在实验方面, 文献[2~5] 分别研究

了 ZnO、GaN、 Mg_2Si 化合物的制备及掺杂对其性能的影响。理论采用的计算方法主要为基于密度泛函理论的第一性原理赝势平面波方法^[6~10]。本文采用基于密度泛函理论(Density functional theory, DFT)的第一性原理赝势平面波方法, 对 Mg_2Si 以及掺 Ag、Al 的能带结构、态密度、介电函数、复折射率、吸收系数、反射率进行了全面计算, 为该材料在光电领域的

收稿日期: 2008-03-11; **收到修改稿日期**: 2008-07-01

基金项目: 国家自然科学基金(60566001, 60766002)、贵州省优秀科技教育人才省长专项基金、省委组织部高层人才科研特助项目、贵阳市科学技术局大学生创业科技项目(6-5)和贵州大学研究生创新基金(省研理工 2007003)资助课题。

作者简介: 陈茜(1981—), 女, 讲师, 博士研究生, 主要从事电子功能材料方面的研究。E-mail: chenzhangqianer@163.com

导师简介: 谢泉(1964—), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事电子功能材料方面的研究。E-mail: qxie@gzu.edu.cn (通信联系人)

进一步开发应用提供了理论依据和实验指导。

2 理论模型和计算方法

Mg_2Si 具有反萤石晶体结构,空间群为 $Fm\bar{3}m$ (No. 225),面心立方 (fcc) 晶格,晶格常数为 $a = 0.635 \text{ nm}^{[11]}$ 。Si 原子形成边长为 a 的面心立方结构,Mg 原子在其内部形成边长为 $a/2$ 的简立方结构,每个晶胞内含有 8 个 Mg 原子和 4 个 Si 原子,如图 1 所示。掺杂时,选取 Mg_2Si 原胞为本体,Ag、Al 原子取代处于 $[0.25, 0.25, 0.25]$ 的 Mg 原子。

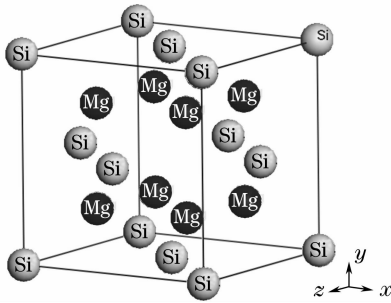


图 1 Mg_2Si 的晶体结构示意图

Fig. 1 Crystal structure of Mg_2Si

采用基于密度泛函理论的第一性原理赝势平面波方法进行计算。计算由 CASTEP 软件包 (Cambridge Serial Total Energy Package)^[12] 完成。首先采用 BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) 算法^[13] 对本体和掺杂后的原胞进行几何结构优化,将原胞中的价电子波函数用平面波基矢进行展开,并设定平面波的截断能量为 310 eV,迭代过程中的收敛精度为 1×10^{-6} eV,选取广义梯度近似来处理交换关联能部分,交换关联势采用 RPBE (Revised Perdew-Burke-Ernzerhof functionals)^[14] 给出的公式,采用模守恒赝势 (Norm-conserving pseudo-potentials)^[15] 来处理离子实与电子间的相互作用;在总能量的计算中,布里渊区积分采用了

$7 \times 7 \times 7$ 的 Monkhorst-Pack 形式^[16] 的高对称特殊 k 点方法,总能量收敛达到 1 meV/atom。参与计算的价态电子 Si 为 $3s^2 3p^2$, Mg 为 $3s^2$, Ag 为 $4d^{10} 5s^1$, Al 为 $3s^2 3p^1$ 。

3 计算结果与讨论

3.1 能带结构

表 1 为在 Mg_2Si 原胞中掺 Ag、Al 原子后,经过晶格弛豫和几何结构优化,得到掺杂后晶格常数的变化。从表 1 可以看出, Mg_2Si 原胞掺 Ag 后的晶格常数和体积略有减小,而掺 Al 后晶格常数和体积的减小程度要大得多。

表 1 Mg_2Si 及掺杂后优化的几何结构参数

Table 1 Crystal parameters of geometry optimization of Mg_2Si with dopant

Physical model	a / nm	b / nm	c / nm	V / nm^3
Mg_2Si	0.449013	0.449013	0.449013	0.0640120
$Mg_2Si + Ag$	0.446908	0.446907	0.446907	0.0629550
$Mg_2Si + Al$	0.435343	0.435343	0.435343	0.0583422

图 2(a) 为未掺杂 Mg_2Si 费米面附近的能带结构^[17]。 Mg_2Si 的能带在价带的 Γ 点得到最大值 0 eV,而在导带的 X 点取得最小值 0.2994 eV,因此 Mg_2Si 具有 $\Gamma_v - \Gamma_c$ 带隙为 0.2994 eV 的间接带隙,与文献[6]中 0.277 eV 是一致的。图 2(b) 为 Mg_2Si 掺 Ag 的费米面附近的能带结构,图 2(c) 为 Mg_2Si 掺 Al 的费米面附近的能带结构。Ag 掺杂 Mg_2Si 后,费米面向价带偏移,费米面插在价带的中间,转变为 p 型半导体,与文献[10, 18]是一致的。这是因为 Ag 原子会从 Mg_2Si 晶体中夺取一个电子,形成 $4d^{10} 5s^2$ 较稳定的价电子排布,同时在晶体中形成一个空穴。Al 掺杂 Mg_2Si 后,费米面向导带偏移,费米面插在导带的中间,为 n 型半导体,与文献[1]是一致的。这是因为 Al 的核外电子排布为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$,容易失去电子成为施主。

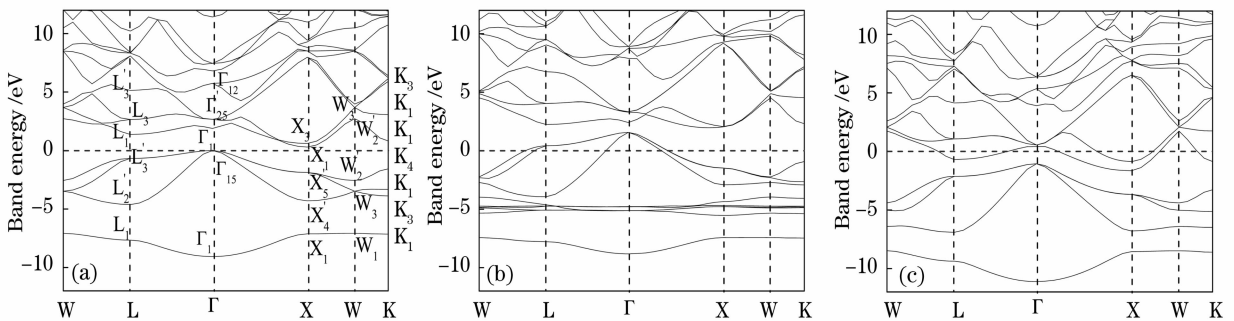


图 2 Mg_2Si (a), Mg_2Si 掺 Ag(b), Mg_2Si 掺 Al(c) 的能带结构

Fig. 2 Calculated energy band structure of Mg_2Si (a), Ag-doped Mg_2Si (b), Al-doped Mg_2Si (c)

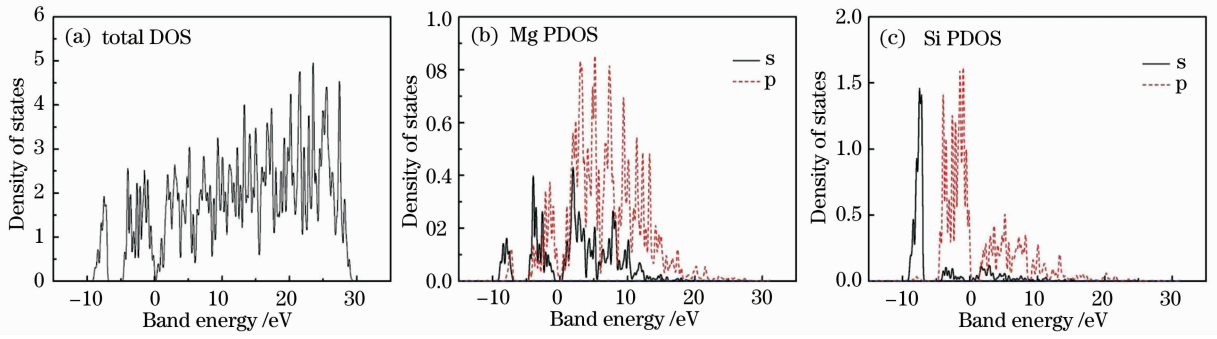


图 3 Mg_2Si 的总态密度及 Mg、Si 的部分态密度

Fig. 3 Calculated total and partial density of states of Mg_2Si

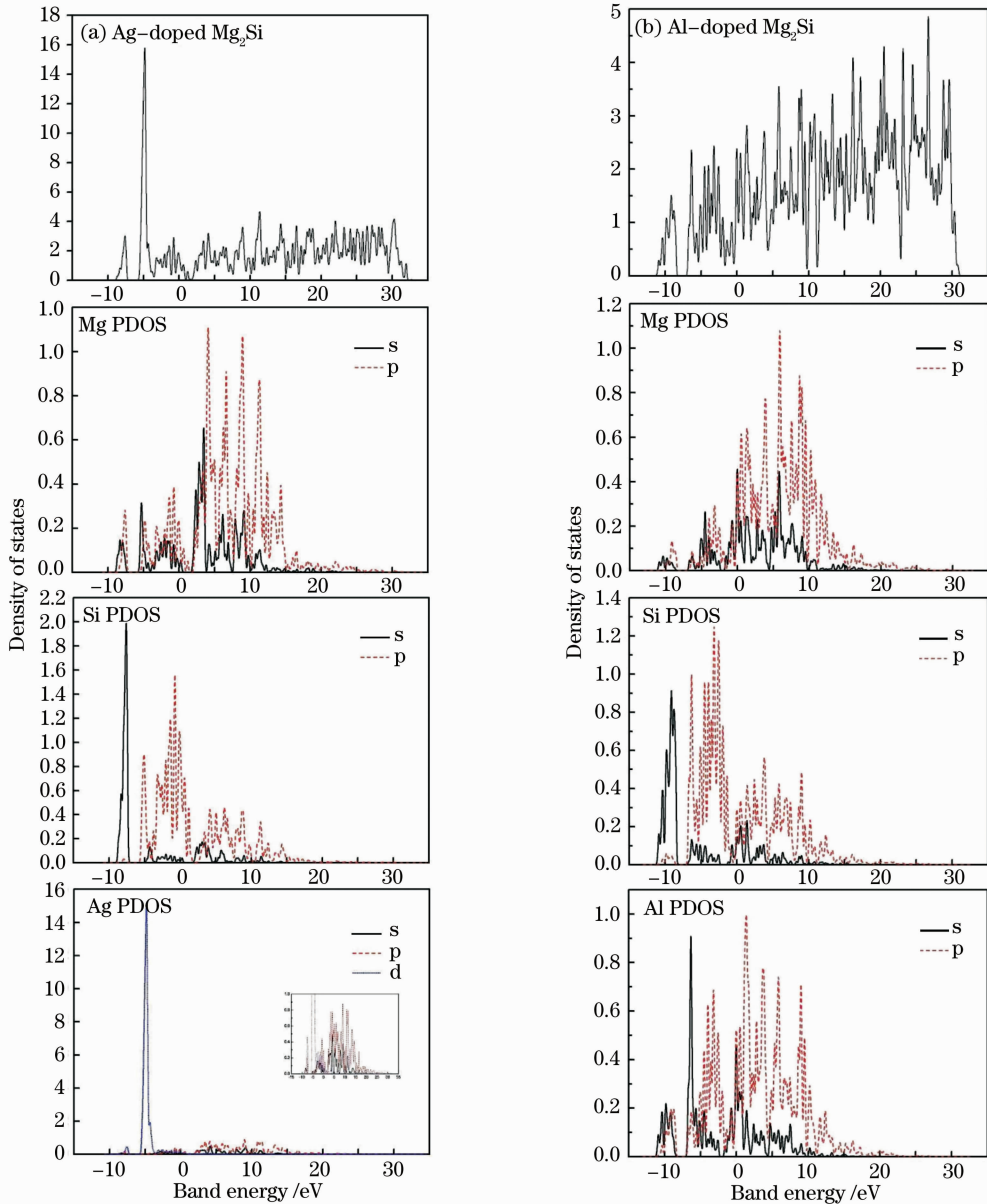


图 4 Mg_2Si 掺 Ag (a), Al (b) 态密度

Fig. 4 Density of state of Mg_2Si doped with Ag (a), Al (b)

3.2 电子态密度

图 3 为未掺杂 Mg_2Si 的总态密度 (DOS) 及

Mg 、 Si 各亚层电子的部分能态密度 (PDOS)^[17]。在 $-10 \sim -5$ eV 的能量范围, Mg_2Si 的态密度主要由

Si 的 3s 态电子构成, Mg 的 3s、3p 态电子也有所贡献, Si 的 3p 态电子贡献很小; 在 $-5 \sim 0$ eV 的能量范围, Mg_2Si 的态密度主要由 Si 的 3p 态电子构成, Mg 的 3s、3p 态电子也有所贡献, Si 的 3s 态电子贡献较小; 在 $0 \sim 20$ eV 的能量范围, Mg_2Si 的态密度主要由 Mg 的 3p 态电子构成, Mg 的 3s、Si 的 3p 态电子也有所贡献, Si 的 3s 态电子贡献较小。因此, Mg_2Si 价带主要由 Si 的 3p 以及 Mg 的 3s、3p 态电子构成; 导带主要由 Mg 的 3s、3p 以及 Si 的 3p 态电子构成。

图 4(a) 为 Mg_2Si 掺 Ag 的总态密度及 Mg、Si、Ag 各亚层电子的能态密度。与未掺杂 Mg_2Si 能带结构[图 2(a)]和态密度(图 3)进行比较, 发现掺 Ag 后, Mg、Si 各亚层电子的能态密度变化不大, 但是在 $-9 \sim -7$ eV 的能量范围, Si 的 3s 态电子峰值变大, 并且费米能级进入价带, 费米面插在价带的中间。掺杂前, 费米能级附近的价带主要由 Si 的 3p 以及 Mg 的 3s、3p 态电子构成; 掺杂后, 费米能级附近的价带主要由 Si 的 3p、Mg 的 3s、3p 以及 Ag 的 3p、4d、5s 态电子共同构成, 只是 Ag 原子的贡献相对 Si 原子的贡献还是较小。在 $-6 \sim -4$ eV 的能量范围, Ag 的分态密度有个很强的峰, 这是 Ag 的 4d 态电子所贡献的。

图 4(b) 为 Mg_2Si 掺 Al 的总态密度及 Mg、Si、Al 各亚层电子的能态密度。与未掺杂 Mg_2Si 能带结构[图 2(a)]和态密度(图 3)进行比较, 发现掺 Al 后, Mg、Si 各亚层电子的能态密度变化不大, 但是在 $-11 \sim -8$ eV 的能量范围, Si 的 3s 态电子峰值

变小, 并且费米能级进入导带, 费米面插在导带的中间。掺杂前, 费米能级附近的导带主要由 Mg 的 3s、3p 以及 Si 的 3p 态电子构成; 掺杂后, 费米能级附近的导带主要由 Mg 的 3s、3p、Si 的 3p 以及 Al 的 3p 态电子共同构成, Al 的 3s 态电子贡献相对较小。两种掺杂结果表明了掺杂对改变材料的导电性能起着非常重要的作用。

3.3 光学性质

3.3.1 复介电函数

介电函数作为沟通带间跃迁微观物理过程与固体电子结构的桥梁, 反映了固体能带结构及其它各种光谱信息。图 5 给出了 Mg_2Si 本体和掺 Ag、Al 的介电函数实部和虚部随入射光子能量变化的曲线图。掺 Ag 的介电函数尖峰明显增多, 并且向高能方向有微小的偏移, 但是峰值有所降低; 掺 Al 的介电函数随入射光子能量变化的曲线变得较平缓, 但是峰值增大, 并且介电函数向低能方向有所偏移。这些现象可以从电子态密度图(图 3、图 4)和能带结构上(图 2)得到解释: 对于掺 Ag 的介电函数, $0 \sim 2$ eV 的介电峰是因为掺入 Ag 的 4d 态电子引起的; 从电子态密度图中可看到, 由于杂质的引入, 引起了能带的偏移, 所以介电峰也有所偏移。图 5(a) 对未掺杂 Mg_2Si 的介电函数虚部标示了六个介电峰: E_0 、 E_1 、 E_2 、 E_3 、 E_4 、 E_5 , 对应的光子能量分别为 1.8650 eV、2.0832 eV、2.2651 eV、2.5197 eV、2.7379 eV、3.1744 eV, 分别对应了图 2(a) 中 $\Gamma_{15} \rightarrow \Gamma_1$ 、 $L'_3 \rightarrow L_1$ 、 $X'_5 \rightarrow X_1$ 、 $L'_3 \rightarrow L_3$ 、 $X'_5 \rightarrow X_3$ 、 $\Gamma_{15} \rightarrow \Gamma'_{25}$ 的跃迁。

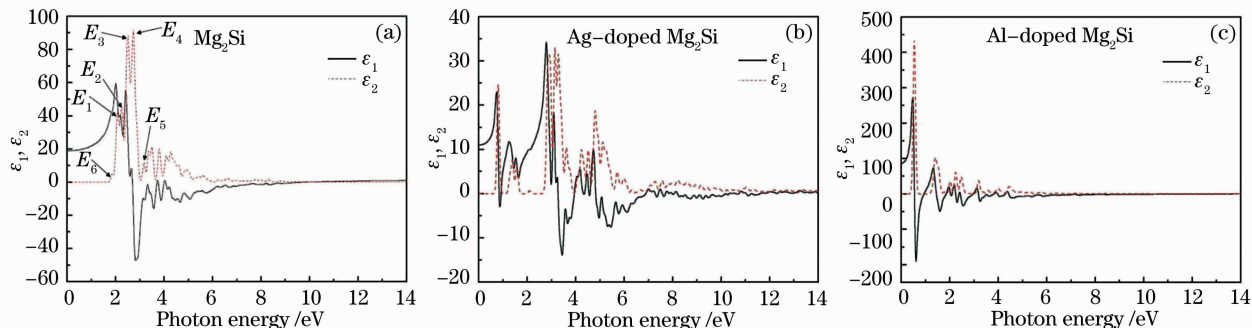


图 5 介电函数

Fig. 5 Dielectric function

从图 5 中还可看出, 掺杂前 Mg_2Si 的静态介电常数 $\epsilon_1(0) = 18.89$, 与文献[18]中 18.8 是一致的。掺 Ag 后, $\epsilon_1(0) = 11.01$, 静态介电常数有所减小, 而掺 Al 后的 $\epsilon_1(0) = 87.03$, 静态介电常数大幅度提高, 计算结果表明掺杂对 Mg_2Si 光学参数的影响是

显著的。

3.3.2 复折射率

由复折射率和复介电函数之间的关系式 $\epsilon_1 = n^2 - k^2$ 、 $\epsilon_2 = 2nk$ 可以得到 Mg_2Si 及掺 Ag、掺 Al 的复折射率。图 6 为 Mg_2Si 及掺 Ag、掺 Al 的折射率

n 和消光系数 k 。Mg₂Si 与文献[19]中结果符合得较好, 折射率 $n_0=4.3460$ 。 n 的主要峰值出现在能量为 1.8650~2.4833 eV 范围内, 最大峰值处对应的光子能量为 2.0105 eV 和 2.4469 eV, 光子能量大于 2.4833 eV 后折射率随光子能量的增加逐渐减小。 k 的主要峰值出现在能量为 1.8650~2.8834 eV 范围内, 能量大于 2.8834 eV 后消光系数随光子能量的增加而减小, 在光子能量达到 12 eV 时消光系数 k 几乎为零。同时, 消光系数在带边表现出强烈的吸收

特征。 掺 Ag 的折射率和消光系数向高能方向有微小的偏移, 最大峰值有所降低, 最大峰值处对应的光子能量为 2.8072 eV, 折射率 $n_0=3.3175$; 掺 Al 的折射率和消光系数峰值增大, 并且向低能方向有所偏移, 最大峰值处对应的光子能量为 0.4951 eV, 折射率 $n_0=9.3289$ 。 对比掺杂前, 掺杂后的折射率和消光系数在 0~2 eV 范围内的峰值是因为掺入 Ag、Al 引起的。

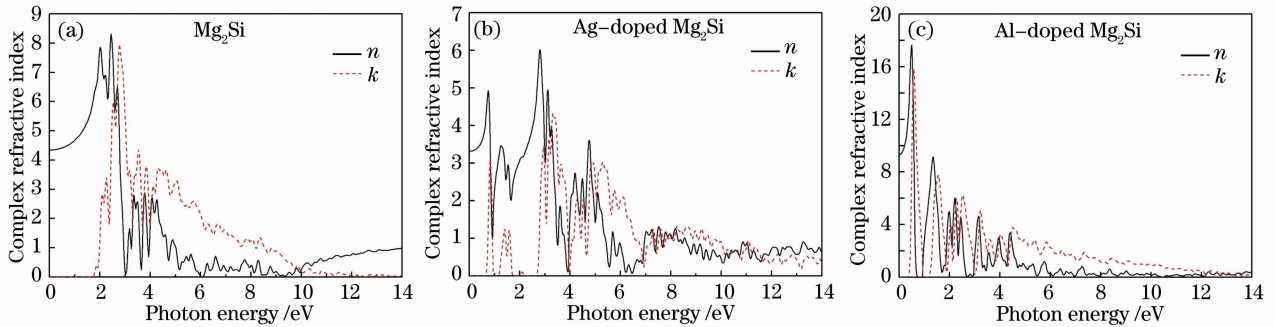


图 6 复折射率

Fig. 6 Complex refractive index

3.3.3 吸收谱

由 $\alpha \equiv 2\omega\kappa/c = 4\pi\kappa/\lambda_0$ 可以得到 Mg₂Si 及掺 Ag、掺 Al 的吸收系数, 如图 7 所示。未掺杂的 Mg₂Si 在能量低于 1.8650 eV 范围吸收系数为零, 能量大于约 20 eV 的范围吸收系数接近零。当光子能量大于 1.8650 eV 后吸收系数开始增大, 在能量为 2.7743 eV 处达到最大峰值 356474.5 cm⁻¹, 能量大于 2.7743 eV 后吸收系数随着光子能量的增加逐渐减小, 在能量约为 10 eV 时, 吸收系数迅速减小, 直至趋于零。掺 Ag 后, 吸收谱的范围增大, 在能量低于 0.5945 eV 以及能量大于 40 eV 的范围吸收系数才为零, 在能量为 5.2914 eV 处达到最大峰值 258355.9 cm⁻¹, 随后随着光子能量的增加缓慢减小。掺 Al 后, 吸收谱的范围略有增大, 在能量低

于 0.3264 eV 以及能量大于约 30 eV 的范围吸收系数为零, 在能量为 4.5239 eV 处达到最大峰值 276220.6 cm⁻¹, 随后随着光子能量的增加逐渐减小。

3.3.4 反射谱

光由空气直接垂直入射到具有复折射率的介质中, 即 $n_1=1, n_2=n+ik$, 可得到反射率与复折射率的关系 $R(\omega) = \frac{(n-1)^2+k^2}{(n+1)^2+k^2}$ 。图 8 为 Mg₂Si 及掺 Ag、掺 Al 的反射谱。未掺杂 Mg₂Si 反射谱带间跃迁主要发生在 3~10 eV 的能量区域, 反射率平均可达 80%, 这是由于在这一能量范围内 Mg₂Si 呈现出金属反射特性, 入射的光大部分被反射了, 对应折射率 n 的值很小。掺杂后, 反射谱范围增大, 但是掺 Ag 后反射率减小, 只有 50% 左右。

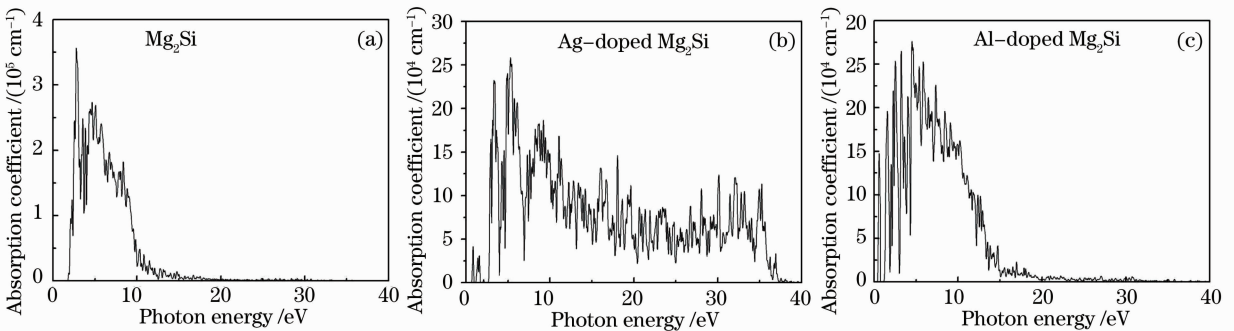


图 7 吸收系数

Fig. 7 Absorption coefficient

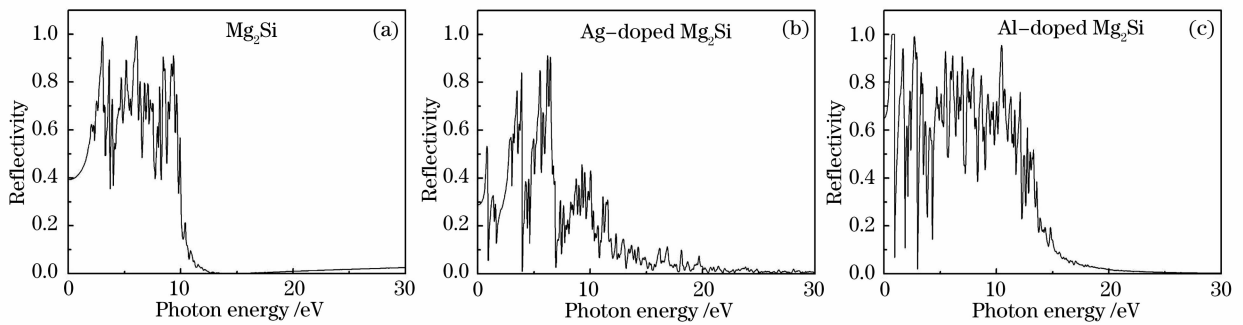


图 8 反射谱

Fig. 8 Reflectivity spectrum

4 结 论

采用基于密度泛函理论的第一性原理赝势平面波方法对本体及掺杂 Mg_2Si 的能带结构、态密度和光学性质进行了理论计算。计算结果表明 Mg_2Si 具有 $\Gamma_v - \Gamma_c$ 带隙为 0.2994 eV 的间接带隙;其价带主要由 Si 的 $3p$ 以及 Mg 的 $3s, 3p$ 态电子构成,导带主要由 Mg 的 $3s, 3p$ 以及 Si 的 $3p$ 态电子构成;静态介电常数 $\epsilon_1(0) = 18.89$, 折射率 $n_0 = 4.3460$ 。 Mg_2Si 掺 Ag 后,费米面向价带偏移,插在价带的中间,转变为 p 型半导体;费米能级附近的价带主要由 Si 的 $3p, \text{Mg}$ 的 $3s, 3p$ 以及 Ag 的 $3p, 4d, 5s$ 态电子共同构成,只是 Ag 原子的贡献相对 Si 原子的贡献还是较小;掺 Ag 后静态介电常数 $\epsilon_1(0) = 11.01$, 折射率 $n_0 = 3.3175$ 。 Mg_2Si 掺 Al 后,费米面向导带偏移,插在导带的中间,为 n 型半导体;费米能级附近的导带主要由 Mg 的 $3s, 3p, \text{Si}$ 的 $3p$ 以及 Al 的 $3p$ 态电子共同构成,Al 的 $3s$ 态电子贡献相对较小;掺 Al 后静态介电常数 $\epsilon_1(0) = 87.03$, 折射率 $n_0 = 9.3289$ 。掺杂明显改变了 Mg_2Si 费米面的位置及费米面附近的能带结构,改变了静态光学参数。因此掺杂是调制材料电子结构、改变材料光电性能的有效手段。

参 考 文 献

- Jiang Hongyi, Zhang Lianmeng. Progress in research on Mg-Si based thermoelectric compounds[J]. *Materials Review*, 2002, **16**(3): 20~22
姜洪义, 张联盟. Mg-Si 基热电化合物的研究现状[J]. *材料导报*, 2002, **16**(3): 20~22
- Peng Xingping, Yang Yinghu, Song Changan *et al.*. Preparation and study of properties of indium-doped ZnO films on Si substrates[J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(11): 1459~1462
朋兴平, 杨映虎, 宋长安 *等*. 在掺杂 ZnO 薄膜的制备及其特性研究[J]. *光学学报*, 2004, **24**(11): 1459~1462
- Tong Xinglin, Zheng Qiguang, Hu Shaoliu *et al.*. Pulsed laser two-beam deposition of Mg-doped GaN thin films[J]. *Chin. J.*

- Lasers*, 2004, **31**(3): 332~336
童杏林, 郑启光, 胡少六 *等*. 脉冲激光双光束沉积掺 Mg 的 GaN 薄膜的研究[J]. *中国激光*, 2004, **31**(3): 332~336
- Fu Guangsheng, Sun Wei, Lü Xueqin *et al.*. Photoluminescence of ZnO films naturally doped and codoped with N and Al[J]. *Chin. J. Lasers*, 2006, **33**(4): 549~551
傅广生, 孙伟, 吕雪芹 *等*. 自然掺杂及 N-Al 共掺杂 ZnO 薄膜的发光特性[J]. *中国激光*, 2006, **33**(4): 549~551
- Xiong Zhihua, Rao Jianping, Jiang Fengyi. Density functional calculations of electronic structure and optical properties on Mg and Ni-doped CdS[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **21**(12): 2225~2228
熊志华, 饶建平, 江凤益. CdS 掺 Mg 和 Ni 电子结构和光学性质的密度泛函理论研究[J]. *光学学报*, 2007, **21**(12): 2225~2228
- Yoji Imai, Akio Watanabe, Masakazu Mukaida. Electronic structures of semiconducting alkaline-earth metal silicides[J]. *J. Alloys and Compounds*, 2003, **358**(1~2): 257~263
- Jun-ichi Tani, Hiroyasu Kido. Thermoelectric properties of Bi-doped Mg_2Si semiconductors[J]. *Phys. B*, 2005, **364**: 218~224
- Jun-ichi Tani, Hiroyasu Kido. First-principles and experimental studies of impurity doping into Mg_2Si [J]. *Intermetallics*, 2008, **16**(3): 418~423
- Min Xinmin, Xing Xueling, Zhu Lei. Electronic structure and thermoelectric property of Mg_2Si and series of doping Sb, Te and Ag[J]. *J. Functional Materials*, 2004, **35**(suppl.): 1154~1159
闵新民, 邢学玲, 朱磊. Mg_2Si 与掺杂系列的电子结构与热电性能研究[J]. *功能材料*, 2004, **35**(增刊): 1154~1159
- Jiang Hongyi. *Study on the Solid-State Reaction Synthesis, Preparation and Thermoelectric Properties of Mg-Si Based Compounds* [D]. Wuhan: Wuhan University of Technology, 2003. 11~14, 68~87
姜洪义. Mg-Si 基化合物的固相反应合成、材料制备及热电性能研究[D]. 武汉: 武汉理工大学博士学位论文, 2003. 11~14, 68~87
- John G. Barlock, Lucio F. Mondolfo. Structure of some aluminum-iron-magnesium-manganese-silicon alloys [J]. *Zeitschrift für Metallkunde/Materials Research and Advanced Techniques*, 1975, **66**(10): 605~611
- Segall M D, Philip Lindan J D, Probert M J *et al.*. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code [J]. *J. Phys: Condense. Matter*, 2002, **14**(11): 2717~2744
- Thomas H. Fischer, Jan Almlof. General methods for geometry and wave function optimization [J]. *J. Phys. Chem.*, 1992, **96**(24): 9768~9774
- B. Hammer, L. B. Hansen, J. K. Nørskov. Improved adsorption energetics within density-functional theory using revised Perdew-Burke-Ernzerhof functionals[J]. *Phys. Rev. B*, 1999, **59**(11): 7413~7421

- 15 D. R. Hamann, M. Schluter, C. Chiang. Norm-conserving pseudopotentials[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1979, **43**(20): 1494~1497
- 16 James D. Pack, Hendrik J. Monkhorst. Special points for "Brillouin-zone integrations"—a reply [J]. *Phys. Rev. B*, 1977, **16**(4): 1748~1749
- 17 Chen Qian, Xie Quan. Study on the electronic structure and optical properties for Mg_2Si [J]. *J. Functional Materials*, 2007, **10**(suppl.): 4119~4123

- 陈 茜,谢 泉. Mg_2Si 电子结构及光学性质的研究[J]. *功能材料*, 2007, **10**(增刊): 4119~4123
- 18 R. G. Morris, R. D. Redin, G. C. Danielson. Semiconducting properties of Mg_2Si single crystals [J]. *Phys. Rev.*, 1958, **109**(6): 1909~1915
- 19 W. J. Scouler. Optical properties of Mg_2Si , Mg_2Ge , and Mg_2Sn from 0.6 to 11.0 eV at 77 °K [J]. *Phys. Rev.*, 1969, **178**(3): 1353~1357

《中国激光》“全固态激光技术”专题征稿启事

全固态激光技术是目前我国在国际上为数不多的从材料源头到激光系统集成拥有整体优势的高技术领域之一,随着全固态激光器件与材料研究的迅速发展,对激光先进制造技术、激光显示技术和激光医疗等领域的发展产生了巨大的推动作用,已取得大量研究成果。《中国激光》计划于 2009 年 6 月正刊上推出“全固态激光技术”专题栏目,现特向国内外广大读者以及作者征集“全固态激光技术”方面原创性的研究论文和综述,旨在集中反映该方面最新的研究成果及研究进展。

征稿范围包括:

- 激光二极管抽运固体激光器
- 光纤激光器
- 半导体激光器及相关技术
- 晶体材料及相关技术
- 光学薄膜技术
- 其他

截稿日期:2009 年 3 月 31 日

投稿方式以及格式:通过网上投稿系统(<http://www.opticsjournal.net/zgjg.htm>)直接上传稿件(主题标明“全固态激光技术”投稿),也可直接将稿件电子版发至邮箱:zhgjg@mail.shnc.ac.cn(主题标明“全固态激光技术”投稿),详情请参见中国光学期刊网:www.opticsjournal.net。本专题投稿文体不限,中英文皆可,其电子版请使用 MS-word 格式,有任何问题请发邮件至 zhgjg@mail.shnc.ac.cn 询问。

《中国激光》编辑部