

文章编号: 0253-2239(2009)10-2848-06

锰掺杂二硅化铬电子结构和光学性质的第一性原理计算

周士芸^{1,2} 谢 泉¹ 闫万珺^{1,2} 陈 茜¹

(¹ 贵州大学新型光电子材料与技术研究所, 贵州 贵阳 550025; ² 贵州安顺学院物理系, 贵州 安顺 561000)

摘要 采用基于第一性原理的密度泛函理论(DFT)赝势平面波方法计算了锰掺杂二硅化铬(CrSi₂)体系的能带结构、态密度和光学性质。计算结果表明未掺杂 CrSi₂ 属于间接带隙半导体, 间接带隙宽度 $\Delta E_g = 0.35$ eV; Mn 掺杂后费米能级进入导带, 带隙变窄, 且间接带隙宽度 $\Delta E_g = 0.24$ eV, CrSi₂ 转变为 n 型半导体。光学参数发生改变, 静态介电常数由掺杂前的 $\epsilon_1(0) = 32$ 变为掺杂后的 $\epsilon_1(0) = 58$; 进一步分析了掺杂对 CrSi₂ 的能带结构、态密度和光学性质的影响, 为 CrSi₂ 材料掺杂改性的研究提供了理论依据。

关键词 光学材料; CrSi₂; 电子结构; 光学性质; 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/AOS20092910.2848

First-Principles Calculation of Electronic Structure and Optical Properties of CrSi₂ with Doping Mn

Zhou Shiyun^{1,2} Xie Quan¹ Yan Wanjun^{1,2} Chen Qian¹

¹ Institute of New Type Optoelectronic Materials and Technology, Guizhou University, Guiyang, Guizhou 550025, China
² Department of Physics, Anshun College, Anshun, Guizhou 561000, China

Abstract The electronic structure and optical properties of Mn-doped CrSi₂ have been calculated using the first-principles pseudo-potential method based on density functional theory. The calculated results show that CrSi₂ is an indirect semiconductor and the indirect band gap is 0.35 eV, the Fermi level enters conduction band and the band gap narrows after it was doped with Mn, with the indirect band gap width $\Delta E_g = 0.24$ eV and CrSi₂ changes into n-type semiconductor thereafter. There are some changes of optical parameters after doping. The static dielectric constant before doping is $\epsilon_1(0) = 32$, then it changes to $\epsilon_1(0) = 58$ after doping. Moreover the influence on electronic structure, density of states and optical properties of CrSi₂ after Mn doping is analyzed as well. The work could provide theoretical basis for doping of CrSi₂ materials in future research.

Key words optical materials; CrSi₂; electronic structure; optical properties; doping; first principles

1 引 言

二硅化铬(CrSi₂)同其他的过渡金属半导体硅化物(如 β -FeSi₂、MnSi₂ 等)一样,具有良好的热稳定性、较高的电导率及较强的抗氧化性能,近年来在微电子领域及光电子领域中正逐渐成为研究热点。

此外,与其他的过渡金属半导体硅化物材料相比, CrSi₂ 与硅衬底之间具有最小的晶格错配度[在 CrSi₂(0001)//Si(111)方向,小于 0.3%]^[1,2],这一特性非常有利于 CrSi₂ 薄膜在硅基上的外延生长,可为一些常用电子元件(如异质结双极型晶体管、肖

收稿日期: 2009-02-13; 收到修改稿日期: 2009-03-23

基金项目: 国家自然科学基金(60566001)、教育部留学回国科研基金(2005383)、贵州省科技厅国际合作项目(2005400102)和安顺市科技计划(20082021)资助课题。

作者简介: 周士芸(1963—),女,副教授,主要从事光电子材料计算方面的研究。E-mail: s.y.zhou@163.com

导师简介: 谢 泉(1964—),男,教授,博士生导师,主要从事光电子功能材料方面的研究。E-mail: qxie@gzu.edu.cn

特基势垒二极管等)的制作及新型光电子器件的开发提供广泛的应用前景。

光电子材料的光电性能主要由介电函数、折射率、光电导率、吸收系数等表征,而这些光学常数则由费米面附近的能带结构、载流子浓度和迁移率等决定,因此研究和计算材料的电子结构成为必要。此外,通过掺杂能有效改变光电材料的晶胞体积及晶胞内各原子的晶体学位置,调制材料的电子结构,从而改变材料的光电性能,以得到电子结构和光学性质更理想的光电材料,达到器件制作的要求。因此对各种光电材料掺杂改性的研究一直是材料研究的热点问题。 CrSi_2 作为一种较典型的过渡金属半导体材料,其本征体的电子结构、各种制备方法尤其是 CrSi_2 薄膜在硅基上的外延生长,近年来在国际上受到了较广泛的关注^[3,10],我们也曾利用第一性原理方法计算了本征 CrSi_2 的电子结构、光学性质以及应力作用下 CrSi_2 的电子结构^[11,12]。但对掺杂 CrSi_2 各种性质的研究,早期就只有 I. Nishida, T. Sakata 等^[13]对 Mn 掺杂 CrSi_2 的半导体性质进行过实验研究,近年来有 H. Hohl, A. P. Ramirez 等^[14]在 1997 年研究了 V 掺杂 CrSi_2 多晶的热电性质,目前仅有 Z. J. Pan 等^[15,16]测量了 V 掺杂和 Al 掺杂 CrSi_2 单晶在不同温度下的电阻率和塞贝克系数;而对掺杂 CrSi_2 的电子结构(包括能带结构和态密度)和光学性质的理论或实验研究还鲜见报道。鉴于此,我们在初步完成了对本征 CrSi_2 光电性质的理论研究的基础上^[11],尝试采用目前计算机模拟计算中较先进的基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理方法(这一方法近年来已被用来研究一些本征化合物半导体和掺杂半导体材料的光学性质^[17~19],之前我们就利用该方法计算了掺杂 Mg_2Si 的电子结构和光学性质^[20])对六角 C40 结构的 CrSi_2 晶体掺入杂质 Mn 后进行了超晶胞处理,确定了其杂质能级在禁带中的相对位置,并对 CrSi_2 晶体在掺杂前后的电子结构和光学性质进行了比较研究。

2 计算方法和模型

本文采用密度泛函理论(DFT)框架下的赝势平面波方法进行计算。首先采用 the Broyden Fletcher Goldfarb Shanno (BFGS)算法^[22~24]对本征和掺杂后的 CrSi_2 超晶胞($2 \times 1 \times 1$)进行几何结构优化,接下来再对优化后的理论模型进行电子结构和光学性质的计算。计算时将粒子势用赝势替代,超胞中的价电子波函数用平面波基组进行展开,

并设置平面波截断能量 $E_{\text{cut}} = 310 \text{ eV}$,迭代过程中的收敛精度为 $2 \times 10^{-6} \text{ eV/atom}$,也即作用在每个原子上的力不大于 0.5 eV/nm 。选取广义梯度近似(GGA)^[25]来处理电子-电子相互作用的交换关联能部分;布里渊区积分采用 Monkhorst-Pack^[26]形式的高对称特殊 k 点方法, k 网格的大小设置为 $3 \times 5 \times 3$,能量计算都在倒易空间中进行。参与计算的价态电子:Si 为 $3s^2 3p^2$;Cr 为 $3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$;Mn 为 $3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$ 。上述计算工作均由 Castep 软件包^[27]完成。

本文选取六方 C40 结构的 CrSi_2 来计算,它属于 $P6_222$ 的空间群,每个晶胞内含有 3 个铬原子和 6 个硅原子,晶格常数为: $a = b = 0.4428 \text{ nm}$, $c = 0.6369 \text{ nm}$ ^[1];晶面角为: $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$ 。计算时选用 $2 \times 1 \times 1$ 的超晶胞,即将原胞的 a 方向扩展一倍,使超胞中的总原子数为 18 个,并将其中的一个铬原子用锰原子替代,使其掺杂浓度为 16.67%。采用替代式掺杂,将 Mn 原子直接取代处于 $[0.5, 0.5, 0.1667]$ 位置处的 Cr 原子。图 1 为 Mn 掺杂后 CrSi_2 超晶胞的模型图。

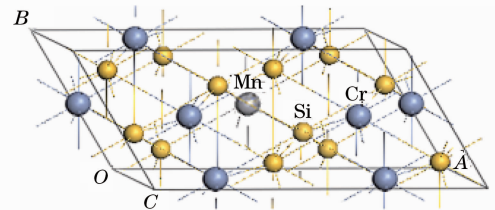


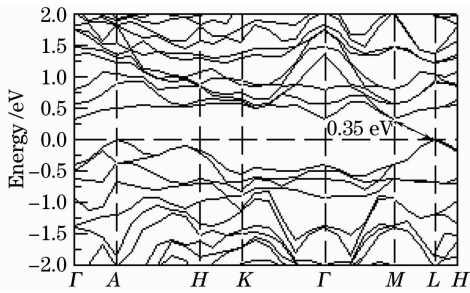
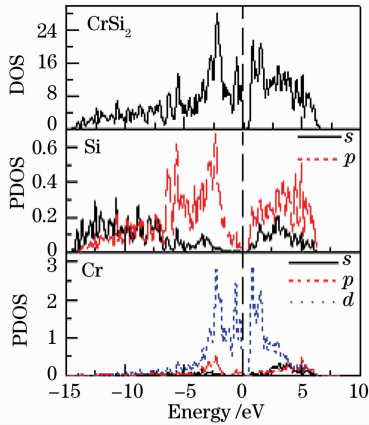
图 1 CrSi_2 掺 Mn 的 $2 \times 1 \times 1$ 超晶胞结构图
Fig. 1 The supercell ($2 \times 1 \times 1$) of $\text{CrSi}_2 \cdot \text{Mn}$

3 计算结果与讨论

3.1 本征 CrSi_2 的计算结果与讨论

为了便于比较分析 Mn 掺杂对 CrSi_2 体相电子结构的影响,首先计算了本征 CrSi_2 晶体的电子结构,包括能带结构、总体态密度和部分态密度,计算结果如图 2 和图 3 所示。图中的虚线代表费米能级,从图 2 中可以看出, CrSi_2 的能带在价带的 L 点得到最大值 0,而在导带的 M 点取得最小值 0.353 eV ,因此 CrSi_2 在价带的 L 点到导带的 M 点表现出间接带隙半导体的性质,带隙宽度 $\Delta E_g = 0.35 \text{ eV}$ 。该结果比文献^[3~5]的计算结果理想;与文献^[28]的计算结果及文献^[6]的实验结果完全吻合;也与我们之前采用单胞进行计算的结果^[11]完全相同,说明采用的计算方法是可靠的。

根据总的态密度(DOS)及各原子的部分态密度

图 2 本征 CrSi₂ 的能带结构Fig. 2 Band structure of intrinsic CrSi₂图 3 本征 CrSi₂ 的总体态密度及分态密度Fig. 3 Total density of state and partial density of states for intrinsic CrSi₂

(PDOS)图(如图 3 所示),可以对本征 CrSi₂ 中 Cr 原子和 Si 原子的核外各层电子对能带和态密度各部分的贡献进行归属。在电子能量较小的范围(-15~ -4 eV),CrSi₂ 的态密度曲线主要由 Si 的 3s 和 3p 层电子构成;在 -4 eV 到费米能级之间(对

表 1 CrSi₂ 优化几何结构参数

Table 1 Crystal parameters of geometry optimization

Physical model	<i>a</i> /nm	<i>b</i> /nm	<i>c</i> /nm	<i>v</i> /nm ³	Minimum energy /eV
CrSi ₂	0.8759	0.4380	0.6308	0.209597	-16122.34
CrSi ₂ :Mn	0.8755	0.4364	0.6312	0.209015	-14307.10

此外,由表 1 中的数据还可以看出,掺杂后体系的总体能量相应的略有增加,但这并不一定表明晶体的稳定性在下降(因为 Cr 原子和 Mn 原子有相同的 *d* 层电子数)。我们认为这可能是由于计算中对 Cr 原子和 Mn 原子的初始选择赝势不同造成的,在计算中 Cr 原子的初始赝势绝对值较大,而 Mn 的则较小,故替换以后绝对能量就会有所升高。

3.2.2 电子结构

采用前面表 1 中结构优化后所得到的几何参数,利用平面波赝势方法计算得到了 CrSi₂ 掺 Mn

应于能带结构图中-4 eV~0 范围内的价带区)的态密度曲线,主要是由 Cr 的 3*d* 层电子和 Si 的 3*p* 层电子构成;而在电子能量大于费米能级 *E_F* 到 5 eV 范围内(对应于 0.35~5 eV 范围的导带区)的态密度则主要由 Cr 的 3*d* 层电子和 Si 的 3*p* 层电子构成,且 Cr 的 3*d* 层电子处于支配地位,而 Si 的 3*p* 层电子的贡献则相对较小,至于 Cr 的 3*s*,3*p* 和 Si 的 3*s* 层电子的贡献就更小。在 5 eV 以上范围的态密度曲线,又主要是由 Si 的 3*p* 层电子构成。综合起来看,在费米面附近,CrSi₂ 的能态密度主要是由 Cr 的 3*d* 和 Si 的 3*p* 层电子的能态密度确定,也即费米能级附近的价带和导带都主要是由 Cr 的 3*d* 电子和 Si 的 3*p* 电子共同构成。因此,本征 CrSi₂ 的电传输性质及载流子类型主要由 Cr 的 3*d* 层电子和 Si 的 3*p* 层电子决定。

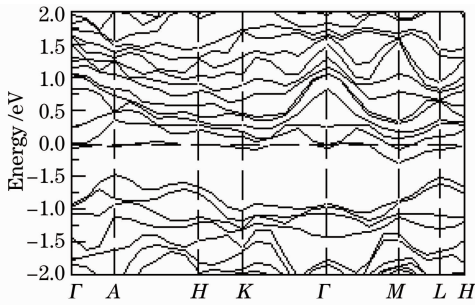
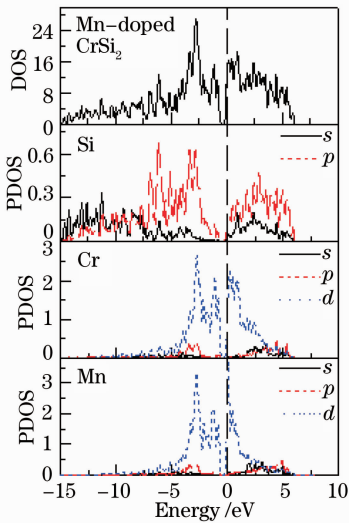
3.2 Mn 掺杂的计算结果与讨论

3.2.1 晶体结构

首先对 Mn 掺杂后的 CrSi₂ 超晶胞进行几何结构优化,并以优化后的模型为基础,分别计算了本征 CrSi₂ 及 Mn 掺杂 CrSi₂ 体系的最小能量。优化后的晶胞参数及体系最小能量的计算结果如表 1 所示。从优化后的数据可以看出,Mn 掺杂后 CrSi₂ 超晶胞的晶格常数 *a* 较掺杂前减小 0.047%,*b* 减小 0.36%,*c* 增大 0.063%,晶胞总体积变化不大,只比掺杂前减小了 1.32%。这是因为 Mn 的共价半径与 Cr 的共价半径相同,都是 0.117 nm,但 Mn 的金属半径(0.124 nm)^[29] 却比 Cr 的金属半径(0.1249 nm)^[30] 略小,因此根据量子化学理论,Mn 掺杂后的晶胞体积略有减小的结果是可以理解的。

后沿布里渊区高对称方向的能带结构和价带、导带的态密度图,如图 4 和图 5 所示。

将图 4、图 5 与未掺杂的能带结构图和态密度图(如图 2、图 3 所示)进行比较,并通过对总态密度和各分电子态密度的分析发现:1)与本征 CrSi₂ 相比,Mn 掺杂后 CrSi₂ 材料的简并能级发生了分裂(如图 4 中的 *M* 点和 *L* 点所示)。这与 I. Nishida 等^[13] 的实验结果是一致的。由图 4、图 5 可看出,掺杂后材料的简并度降低主要是掺杂原子的 3*d* 轨道受到周围原子的晶场作用分裂所致;2)掺杂前,导带

图 4 Mn 掺杂 CrSi₂ 的能带结构Fig. 4 Band structure of Mn-doped CrSi₂图 5 Mn 掺杂 CrSi₂ 的总体态密度及分态密度Fig. 5 Total density of state and partial density of states for Mn-doped CrSi₂

底在 M 点取得 0.353 eV , 价带顶在 L 点取得 0 , 带隙宽度 $\Delta E_g = 0.35 \text{ eV}$; 掺杂后, 导带底在 M 点取得 -0.26 eV , 价带顶在 L 点取得 -0.5 eV , 带隙宽度 $\Delta E_g = 0.24 \text{ eV}$, 显然整个能带向低能方向发生了偏移, 且带隙变窄。从能带结构图 4 上可看出, 带隙变

窄的原因主要是掺 Mn 后, 在导带的下方出现了几层由掺杂原子贡献的杂质带, 占据了一定的禁带宽度, 从而使带隙变窄; 3) 掺杂前, 费米能级附近的价带和导带都主要由 Cr 原子 $3d$ 轨道上的电子构成; 掺杂后, 费米能级进入导带, 费米面插在导带的中间, 费米能级附近的价带和导带就主要由 Cr 原子 $3d$ 轨道上的电子和掺杂原子 Mn 的 $3d$ 轨道上的电子共同构成; 尤其是进入费米能级 E_F 处的态密度则主要来源于掺杂原子 Mn 的 $3d$ 电子的贡献, 而 Cr 原子的贡献则相对较小。这是由于 Mn 的核外电子排布 ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$) 与 Cr 的核外电子排布 ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$) 相似, 只是 $4s$ 层相差一个电子, 又由图 3 可知在本征 CrSi₂ 中 Cr 的 d 层电子对 CrSi₂ 的态密度影响很大, 因此, Mn 替代 Cr 掺杂后, 由于 Mn 的 s 层多一个电子, 使 Mn 原子成为施主, 在导带底附近贡献了一定数量的电子, 从而使费米面向导带偏移, 使掺杂后 CrSi₂ 的导电类型变为 n 型, 提高了材料的电导率。这一结论与 I. Nishida, T. Sakata 等^[13] 的早期实验研究结果是一致的。上述计算表明掺杂对改变材料的导电性能起着非常重要的作用。

3.2.3 光学性质

半导体的光学性质通常由复介电响应函数

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

表示。由于电子结构计算中无论是带间还是带内跃迁频率都远大于声子频率, 且使用的方法是单电子近似法, 故可以忽略声子在间接跃迁过程的参与, 仅考虑电子激发。从量子力学的观点看, 带间跃迁的光吸收过程是电子在辐射电磁场微扰作用下从低能态跃迁到高能态的过程。从直接跃迁几率的定义可推导出晶体复介电响应函数的虚部为^[30,31]

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{\pi}{\epsilon_0} \left(\frac{e}{m\omega} \right)^2 \cdot \sum_{\mathbf{V}, \mathbf{C}} \left\{ \int_{\text{BZ}} \frac{2d\mathbf{K}}{(2\pi)^3} |\mathbf{a} \cdot \mathbf{M}_{\mathbf{CV}}(\mathbf{K})|^2 \delta[E_{\mathbf{C}}(\mathbf{K}) - E_{\mathbf{V}}(\mathbf{K}) - \hbar\omega] \right\}, \quad (2)$$

进一步地由固体的能带结构, 利用克拉默斯-克勒尼希(Kramers-Kronig)色散关系可得到复介电响应函数的实部为

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{8\pi e^2}{m^2} \sum_{\mathbf{V}, \mathbf{C}} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot \frac{|\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{\mathbf{CV}}(\mathbf{k})|^2}{[E_{\mathbf{C}}(\mathbf{k}) - E_{\mathbf{V}}(\mathbf{k})]} \cdot \frac{\hbar^3}{[E_{\mathbf{C}}(\mathbf{k}) - E_{\mathbf{V}}(\mathbf{k})]^2 - \hbar^2 \omega^2}, \quad (3)$$

其中 C, V 分别表示导带和价带, BZ 为第一布里渊区, \mathbf{K} 为倒格矢, $|\mathbf{a} \cdot \mathbf{M}_{\mathbf{CV}}(\mathbf{K})|^2$ 为动量跃迁矩阵元, $E_{\mathbf{C}}(\mathbf{K}), E_{\mathbf{V}}(\mathbf{K})$ 分别为导带和价带上的本征能级, ω 为角频率。

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。对电介质和半导体来说, 在讨论辐射场和极化介质的相互作用时, 复介电函数在某种意义上比宏观光学常数更能表征材料的物理特性, 并且更易于和物理过程的微观模型及固体的微观电子

结构联系起来,它们是固体光学常数的另一种表述。因此本文只给出了本征和掺杂 CrSi_2 的介电函数的有关计算结果。

由(2)式和(3)式,通过计算得到了本征 CrSi_2 和 Mn 掺杂 CrSi_2 的介电函数虚部和实部随入射光能量的变化曲线[入射光采用非极化光,入射方向沿(001)方向],如图6所示。图中可清楚地看到,掺杂前 $\epsilon_2(\omega)$ 有两个较强的跃迁峰,两个介电峰的形成可通过对比能带结构图和态密度图(如图2和图3所示)得到解释:第一跃迁峰对应的带间跃迁是由 Cr 的 $3d$ 电子和 Si 的 $3p$ 电子激发到导带所产生;第二跃迁峰对应的带间跃迁则主要是由 Cr 的 $3d$ 电子混合一部分 Cr 的 $3p$ 电子、 $4s$ 电子和 Si 的 $3p$ 电子、 $3s$ 电子的受激跃迁所引起。上述计算结果与 V. Bellani 等^[6]的计算和实验结果是吻合的。掺入 Mn 后, $\epsilon_2(\omega)$ 最大的变化是在约 0.15 eV 处出现了一个新的跃迁峰,而原来分别位于约 1.38 和 1.45 eV 处的两个跃迁峰的峰值有所降低(尤其是位于 1.38 eV 处的跃迁峰峰值降低较大),峰位也有一向低能方向的微小偏移。上述现象可以从掺杂后的电子态密度(如图5所示)和能带结构图(如图4所示)上得到解释:在前面分析能带结构和态密度时我们知道,掺杂引入了杂质原子 Mn,而杂质原子 Mn 的 $3d$ 电子大部分位于费米能级附近。所以我们认为,0.15 eV 处的跃迁峰是杂质原子 Mn 的 $3d$ 轨道电子之间的跃迁产生的。此外从图4中可清楚地看到,由于杂质 Mn 的引入,导致整个能带明显向低能方向下移,所以在原位于约 1.38 和 1.45 eV 处的两个跃迁峰峰位也有一向低能方向的微小偏移。从图6中还可看出,掺杂前 CrSi_2 的静态介电常数 $\epsilon_1(0) = 32$, 掺 Mn 后的 $\epsilon_1(0) = 59$, 静态介电常数

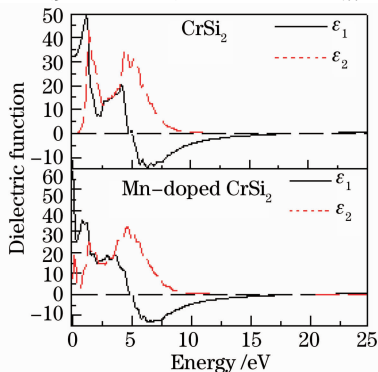


图6 掺杂与未掺杂 CrSi_2 的介电函数

Fig. 6 The dielectric function of Mn-doped CrSi_2 and undoped CrSi_2

有明显的提高,表明掺杂对 CrSi_2 光学参数的影响是显著的。

4 结 论

使用基于第一性原理的密度泛函理论(DFT)赝势平面波方法对本体及掺杂 CrSi_2 的能带结构、态密度和光学性质进行了理论计算。能带计算结果表明本征 CrSi_2 是具有 0.35 eV 狭窄能隙的间接带隙半导体;Mn 替代 Cr 掺杂后,因为杂质 Mn 的引入,能带有所偏移,费米能级进入导带,费米面插在导带的中间,带隙变窄,且间接带隙宽度 $\Delta E_g = 0.24$ eV;电子态密度的计算表明,费米能级 E_F 处的态密度主要来源于掺杂原子 Mn 的贡献,掺杂后 Mn 原子成为施主,在导带底附近贡献了一定数量的电子,从而使费米面向导带偏移,使掺杂后 CrSi_2 的导电类型变为 n 型,提高了材料的电导率。光学性质的计算表明,掺杂后 CrSi_2 晶体的光学参数发生改变,静态介电常数由掺杂前的 $\epsilon_1(0) = 32$ 变为掺杂后的 $\epsilon_1(0) = 58$ 。总之掺杂会明显改变 CrSi_2 费米面的位置及费米面附近的能带结构;改变材料的导电类型;提高静态光学参数。表明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

- 1 V. E. Borisenko (Ed.). *Semiconducting Silicides*[M]. Berlin: Springer, 2000. 85~87
- 2 N. G. Galkin, T. A. Velichko, S. V. Skripka *et al.*. Semiconducting and structural properties of CrSi_2 A-type epitaxial films on Si(111) [J]. *Thin Solid Films*, 1996, **280**: 211~220
- 3 L. F. Mattheiss. Structural effects on the calculated semiconductor gap of CrSi_2 [J]. *Phys. Rev. B*, 1991, **43**(2): 1863~1866
- 4 L. F. Mattheiss. Electronic structure of CrSi_2 and related refractory disilicides [J]. *Phys. Rev. B*, 1991, **43**(15): 12549~12555
- 5 M. P. C. M. Krijn, R. Eppenga. First-principles electronic structure and optical properties of CrSi_2 [J]. *Phys. Rev. B*, 1991, **44**(16): 9042~9044
- 6 V. Bellani, G. Guizzetti, F. Marabelli *et al.*. Theory and experiment on the optical properties of CrSi_2 [J]. *Phys. Rev. B*, 1992, **46**(15): 9380~9389
- 7 J. M. Shannon, J. D. Hoyland, E. G. Gerstner. Growth of CrSi_2 by radiation enhanced diffusion at room temperature [J]. *J. Appl. Phys.*, 2002, **92**(9): 5068~5071
- 8 O. Filonenko, M. Falke, H. Hortenbach *et al.*. Structure of thin CrSi_2 films on Si(001) [J]. *Appl. Surf. Sci.*, 2004, **227**: 341~348
- 9 T. Shishido, S. Okada, Y. Ishizawa *et al.*. Molten metal flux growth and properties of CrSi_2 [J]. *J. Alloys Comd.*, 2004, **383**: 319~321
- 10 D. Decker, E. Loos, Chr. Drobniowski *et al.*. Structure and properties of CrSi_2/Si multilayers [J]. *Microelectron. Eng.*, 2004, **76**: 331~335

- 11 S. Y. Zhou, Q. Xie, W. J. Yan *et al.*. First-principles study on the electronic structure and optical properties of CrSi₂[J]. *Sci. China Ser G-Phys Mech Astron*, 2009, **52**(1): 46~51
- 12 S. Y. Zhou, Q. Xie, W. J. Yan *et al.*. First-principles study on the electronic structure of stressed CrSi₂[J]. *Sci. China Ser G-Phys Mech Astron*, 2009, **52**(1): 76~81
- 13 I. Nishida, T. Sakata. Semiconducting properties of pure and Mn-doped chromium disilicides[J]. *J. Phys. Chem. Solids*, 1978, **39**: 499~505
- 14 H. Hohl, A. P. Pamirez, T. T. M. Palstra *et al.*. Thermoelectric and magnetic properties of Cr_{1-x}V_xSi₂ solid solutions[J]. *J. Alloys Compd*, 1997, **248**: 70~76
- 15 Z. J. Pan, L. T. Zhang, J. S. Wu. Effects of Al doping on the transport performances of CrSi₂ single crystals[J]. *Scripta Mater.*, 2007, **56**: 245~248
- 16 Z. J. Pan, L. T. Zhang, J. S. Wu. Effects of V doping on the transport performances of CrSi₂ single crystals[J]. *Scripta Mater.*, 2007, **56**: 257~260
- 17 Xiao Qi, Qiu Guanzhou, Qin Wenqing *et al.*. Density function calculation of electronic structure and optical properties of FeS₂ (Pyrite) [J]. *Acta Optica Sinica*, 2002, **22**(12): 1501~1506
肖奇, 邱冠周, 覃文庆等. FeS₂(Pyrite) 电子结构与光学性质的密度泛函计算[J]. *光学学报*, 2002, **22**(12): 1501~1506
- 18 Zhang Fuchun, Deng Zhouhu, Yan Junfeng *et al.*. First-principles calculation of electronic structure and optical properties of ZnO[J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(8): 1203~1209
张富春, 邓周虎, 阎军锋等. ZnO 电子结构与光学性质的第一性原理计算[J]. *光学学报*, 2006, **26**(8): 1203~1209
- 19 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, **27**(12): 2225~2228
熊志华, 饶建平, 江风益. 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, **27**(12): 2225~2228
- 20 Chen Qian, Xie Quan, Yang Chuanghua *et al.*. First-principles calculation of electronic structure and optical properties of Mg₂Si with doping[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(1): 229~235
陈茜, 谢泉, 杨创华等. 掺杂 Mg₂Si 电子结构及光学性质的第一性原理计算[J]. *光学学报*, 2009, **29**(1): 229~235
- 21 C. G. Broyden. The convergence of a class of double-rank minimization algorithms, 2 the new algorithm[J]. *J. Inst. Math. Appl.*, 1970, **6**: 222~231
- 22 R. Fletcher. A new approach to variable metric algorithms[J]. *Comput. J.*, 1970, **13**(3): 317~322
- 23 D. Goldfarb. A family of variable-metric methods derived by variational means[J]. *Math. Comput.*, 1970, **24**(109): 23~26
- 24 D. F. Shanno. Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization[J]. *Math. Comput.*, 1970, **24**: 647~656
- 25 J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Phys. Rev. Lett*, 1996, **77**: 3865~3868
- 26 H. J. Monkhorst, J. D. Pack. Special points for Brillouin-zone integrations[J]. *Phys. Rev. B*, 1976, **13**: 5188~5192
- 27 M. D. Segall, J. D. Gilip Lindan, M. J. Probert *et al.*. First-principles simulation; ideas, illustrations and the castep code[J]. *J. Phys. Cond. Matt*, 2002, **14**(11): 2717~2744
- 28 A. V. Krivosheeva, V. L. Shaposhnikov, V. E. Borisenko. Electronic structure of stressed CrSi₂[J]. *Mater. Sci. Eng. B*, 2003, **101**: 309~312
- 29 Gu Qingchao, Lou Shucong, Dai Qingping. Table of Chemical [M]. Nanjing: Phoenix Science Press, 1979. 9~16
顾庆超, 娄书聪, 戴庆平. 化学用表[M]. 南京: 江苏科学技术出版社, 1979. 9~16
- 30 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
- 31 Fang Rongchuan. Solid Spectroscopy[M]. Hefei: University of Science and Technology of China 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