

文章编号: 0253-2239(2009)02-0448-06

YTaO₄ 和 LuTaO₄ 电子结构和光学性质的理论计算

向 东 刘 波 顾 牡 刘 小 林 黄 世 明 倪 晨

(同济大学波耳固体物理研究所波与材料的微结构实验室, 上海 200092)

摘要 基于第一性原理的赝势平面波方法计算了完整 YTaO₄ 和 LuTaO₄ 晶体的电子结构、介电函数、折射率、吸收光谱。计算结果表明,二者价带的贡献都主要来源于 O2p 态。导带分为两部分,下导带都主要由 Ta5d 态组成, YTaO₄ 上导带主要由 Y4d 态组成。而 LuTaO₄ 上导带的贡献主要来源于 Lu5d 态。在 $\omega = 0$ 时, YTaO₄ 和 LuTaO₄ 晶体的介电常数和折射率都非常接近;介电函数虚部的低能特征峰(小于 10.0 eV)归因于 TaO₄³⁻ 基团的电子跃迁,对应电子从 O2p 价带到 Ta5d 导带的跃迁;10.0~15.0 eV 之间的特征峰对应于电子从价带到上导带的跃迁;大于 15.0 eV 的特征峰则归因于 O2s 态的内层电子到导带的跃迁。两种晶体在紫外区的吸收带宽而强,此吸收带归属于从氧(2p)到钽 d⁰ 离子的电荷转移跃迁。

关键词 线性光学; 电子结构; 第一性原理计算; 光学性质

中图分类号 O734 **文献标识码** A **doi:** 10.3788/AOS20092902.0448

Theoretical Calculation of Electronic Structures and Optical Properties of YTaO₄ and LuTaO₄

Xiang Dong Liu Bo Gu Mu Liu Xiaolin Huang Shiming Ni Chen

(Laboratory of Waves and Microstructure Materials, Pohl Institute of Solid State Physics, Tongji University, Shanghai 200092, China)

Abstract Electronic structures, dielectric functions, refraction indices, absorption spectra of perfect YTaO₄ and LuTaO₄ crystals are calculated using pseudo-potentials and plane waves based on first-principles method. The results show that valence bands of YTaO₄ and LuTaO₄ are both from O2p states. Conduction band is divided into two parts. The lower conduction band is mainly composed of Ta5d states and the upper conduction band involves contribution mainly from Y4d states of YTaO₄ and Lu5d states of LuTaO₄. When ω equals to zero, the dielectric constants and refractive indices between YTaO₄ and LuTaO₄ are close to each other. The low-energy characteristic peaks below 10.0 eV of their imaginary parts originate from the electron transition within TaO₄³⁻ complex. The low-energy characteristic peaks between 10.0 eV and 15.0 eV correspond to the electron transition from valence band to the upper conduction band. The peaks beyond 15.0 eV are due to the electron transition from O2s to conduction band. Last but not the least, the ultraviolet absorption bands of YTaO₄ and LuTaO₄ are broad and strong. They correspond to the charge transfer transition from oxygen (2p) to d⁰ ion of tantalum.

Key words linear optics; electronic structure; first-principle calculation; optical properties

1 引 言

钽酸盐晶体 MTaO₄ (M = Y, Lu) 是一类很好的发光基质材料,对 X 射线吸收强,辐照硬度高,化学性质稳定。材料掺入 Eu³⁺、Tb³⁺ 等稀土发光离子后,可用作 X 射线电荷耦合器件(X-ray CCD)、阴

极射线管(CRT)、场致发射显示器(FED)的闪烁探测材料,在 X 射线测量、平板显示等方面有着重要的应用^[1,2]。稀土正钽酸盐有三种结构^[3,4]: 1) M 型,褐钇铋矿结构,属 I2 群; 2) M' 型,属 P2/a 群; 3) T 型,白钨矿结构,属 I4₁/a 群。三种结构的晶体

收稿日期: 2008-05-15; **收到修改稿日期:** 2008-08-06

基金项目: 国家自然科学基金(50672068)和上海市科学技术委员会(05ZR14123,07DZ22302)资助课题。

作者简介: 向 东(1982-),男,硕士研究生,主要从事固体发光理论方面的研究。E-mail: xiangsitian@163.com

导师简介: 顾 牡(1961-),男,教授,博士生导师,主要从事固体发光方面的研究。E-mail: mgu@mail.tongji.edu.cn

中, M' 型是一种更为有效的发光基质^[4]。

G. Blasse 等^[5]研究了 M 型 YTaO₄, LuTaO₄ 晶体的发光。结果表明, 紫外区 YTaO₄, LuTaO₄ 晶体的发光峰值分别在 335 nm 和 325 nm。李博等^[6,7]研究了稀土离子掺杂 YTaO₄ 晶体的能量传递机理, 从实验上发现了从 TaO₄³⁻ 到某些稀土离子的能量传递过程。近年来人们曾先后计算了 LiTaO₃, KTaO₃, LiNbO₃ 等钽酸盐和铌酸盐晶体的电子结构和光学性质^[8~12]。通过第一性原理的赝势平面波方法计算了 M' 型完整 YTaO₄, LuTaO₄ 晶体的电子结构、介电函数、折射率、吸收光谱。研究了晶体光学性质与电子结构之间的联系, 从而为理解该材料的光学性能提供指导, 同时也为以后的实验工作提供参考。

2 计算方法

2.1 计算模型和方法

M' 型 MTaO₄ 晶体结构如图 1 所示, 每个单胞中含有两个 MTaO₄ 分子, 共 12 个原子, Ta 原子位于发生了畸变的八面体中, 每个 Ta 原子与六个 O 原子成键。M' 型 YTaO₄ 和 LuTaO₄ 单斜晶胞相应的参数分别为 $a=0.5298$ nm, $b=0.5451$ nm, $c=0.5111$ nm, $\beta=96.44^\circ$; $a=0.5239$ nm, $b=0.5425$ nm, $c=0.5060$ nm, $\beta=96.10^\circ$ ^[4]。

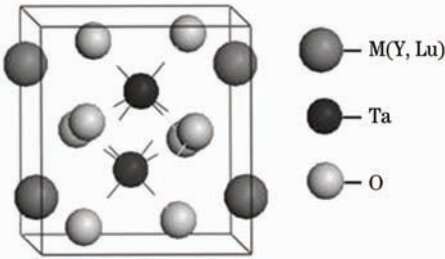


图 1 M' 型 MTaO₄ 晶体结构

Fig. 1 Crystal structure of M' type MTaO₄

基于平面波和赝势方法的 ABINIT 程序包^[13,14], 对 YTaO₄, LuTaO₄ 晶体的电子结构和光学性质进行了第一性原理计算。利用平面波赝势方法, 将离子势用赝势替代, 电子波函数通过平面波基组展开。电子-电子相互作用的交换关联势采用了广义梯度近似(GGA)^[15]。赝势选取 Fritz-Haber-Institute (FHI) 赝势^[16], 由 Perdew-Burke-Ernzerhof 势函数产生^[17,18]。考虑 YTaO₄ 的价电子组态为: Y[5s²4d¹], Ta[5d³6s²], O[2s²2p⁴]; LuTaO₄ 的价电子组态为: Lu[4f¹⁴5d¹6s²], Ta[5d³6s²], O[2s²2p⁴]。用于展开的平面基波数

量由平面波截断动能决定。在计算中不断增大截断能量的同时, 观察体系总能量的变化, 当体系的总能量差小于 0.001 eV/atom 时, 确定截断能量的值为 70 Ha。自洽迭代过程中采用简约布里渊区中 4×4×4 的网格点阵, 此点阵在布里渊区中共产生了 16 个 K 点。原子坐标和晶格常数的优化采用 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)^[19] 算法。对于光学性质的计算还采用了剪刀算符修正(剪刀算符值取为带隙实验值与计算值的差), 使计算的带隙值等于实验带隙值, 以弥补由于广义梯度近似造成的带隙值偏小, 从而使得光学性质的计算能够更准确。

2.2 光学性质的理论描述

介电函数是在动表象下计算的, 需要知道占据态和非占据态之间的动量算符 \mathbf{P} 的矩阵元, 介电函数的虚部 $\epsilon_2(\omega) = \text{Im} \epsilon$ 表示为^[20]

$$\epsilon_2^{ij}(\omega) = \frac{4\pi e^2}{\Omega m^2 \omega} \sum_{\mathbf{K}n\sigma} \langle \mathbf{K}n\sigma | P_i | \mathbf{K}n'\sigma \rangle \langle \mathbf{K}n'\sigma | P_j | \mathbf{K}n\sigma \rangle \times f_{\mathbf{K}n} (1 - f_{\mathbf{K}n'}) \delta(E_{\mathbf{K}n'} - E_{\mathbf{K}n} - \hbar\omega), \quad (1)$$

式中 e 是电子的电荷, m 为电子质量, Ω 为晶胞的体积, $f_{\mathbf{K}n}$ 为费米分布函数, $|\mathbf{K}n\sigma\rangle$ 为第 n 个本征值、动量为 \mathbf{K} 、自旋为 σ 的晶体的波函数。介电函数的实部 $\epsilon_1(\omega)$ 可以用 Kramers-Kronig 关系求得:

$$\epsilon_1 = \text{Re}[\epsilon(\omega)] = 1 + \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \epsilon_2(\omega') \left(\frac{1}{\omega' - \omega} + \frac{1}{\omega' + \omega} \right) d\omega', \quad (2)$$

其他光学常数可以通过介电函数而获得。例如, 折射率 $n(\omega)$ 、吸收系数 $I(\omega)$ 均可由 $\epsilon_1(\omega)$ 、 $\epsilon_2(\omega)$ 得到^[21], 折射率和吸收系数分别推得为

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\epsilon_1(\omega) + \sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)}}{2}}, \quad (3)$$

$$I(\omega) = \sqrt{2}\omega [\sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} - \epsilon_1(\omega)]^{1/2}. \quad (4)$$

以上关系是分析能带结构和光学性质的理论依据。从某种意义上说, 复介电响应函数 $\epsilon(\omega)$ 比宏观光学常数更能表征材料的物理特性, 更易于与固体的电子结构相联系^[22]。

3 结果与讨论

3.1 几何结构优化

通过优化晶体的几何结构, 得到 YTaO₄, LuTaO₄ 晶胞的体积分别为 161.023×10^{-30} m³, 157.937×10^{-30} m³。表 1 是晶格参数 a, b, c 和角度

β 的计算值与实验值的比较。可以发现,结构优化得到的理论晶胞参数与实验值符合较好。

表 1 晶胞参数计算值与实验值的比较

Table 1 Comparison of calculated and experimental values of cell parameters

Cell parameters	YTaO ₄		LuTaO ₄	
	This work	Experimental value ^[4]	This work	Experimental value ^[4]
$a / 10^{-10}$ m	5.475	5.298	5.425	5.239
$b / 10^{-10}$ m	5.591	5.451	5.603	5.425
$c / 10^{-10}$ m	5.311	5.111	5.246	5.060
$\beta / (^{\circ})$	97.92	96.45	97.92	96.10

3.2 电子结构

在优化晶体结构的基础上,对 YTaO₄ 晶体的电子结构性质进行了计算。图 2 是计算得到的 YTaO₄ 能带结构图。YTaO₄ 为间接带隙材料,价带最高点在 Z 点,导带最低点在 E 点,带隙为 3.13 eV。价带顶能带变化较缓慢,表明了电子具有较大的有效质量。图 3 为计算得到的 YTaO₄ 的总态密度(TDOS)和分态密度(PDOS)图。-16 eV 附近有一个宽度约为 2 eV 的窄带,主要是 O 的 2s 态;-4.8~0 eV 之间的态组成了价带(VB),这些态主要来源于 O 的 2p 态。3.13~5.5 eV 之间的态组成了下导带(CB),主要来源于 Ta 的 5d 态,其中还含有少量 Y 的 4d 态和 O2p 态的贡献。5.5 eV 以上的态为上导带,主要由 Y 的 4d 态构成。采用了广义梯度近似(GGA)所计算的禁带宽度通常会比实验值低,为此,在光学性质的计算中采用了剪刀算符修正。

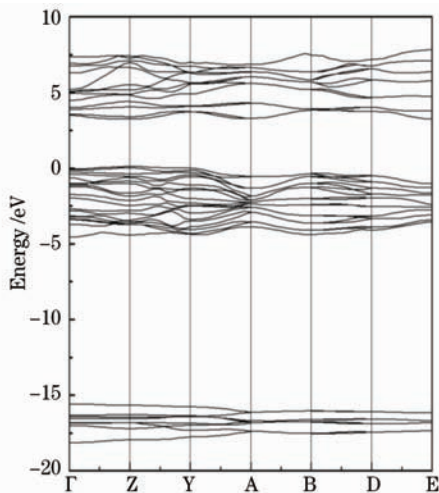


图 2 YTaO₄ 能带结构

Fig. 2 Energy-band structure of YTaO₄

图 4 为 LuTaO₄ 的电子态密度图,其电子结构与 YTaO₄ 的有些类似, LuTaO₄ 带隙为 3.07 eV, LuTaO₄ 价带中除了 O2p 态以外,还包含了 Lu 的 4f

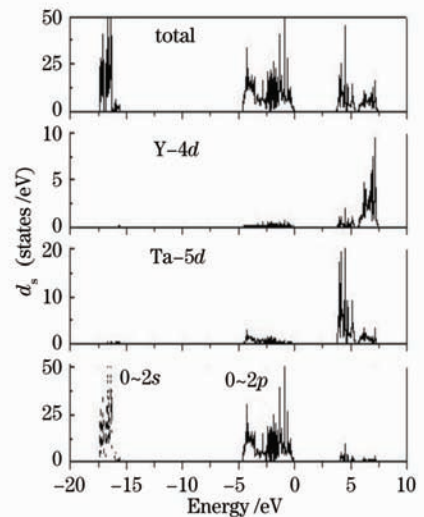


图 3 YTaO₄ 总态密度和分态密度图

Fig. 3 TDOS and PDOS of YTaO₄

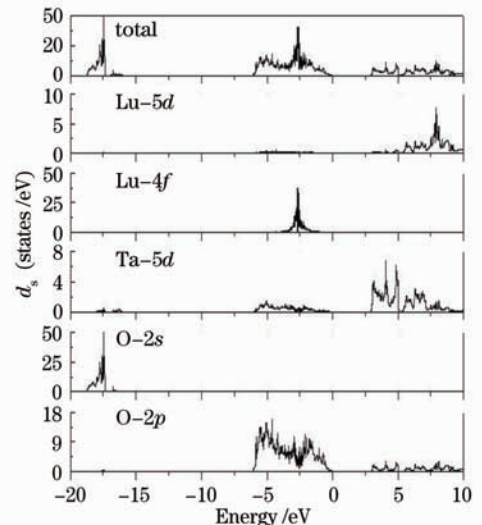


图 4 LuTaO₄ 总态密度和分态密度图

Fig. 4 TDOS and PDOS of LuTaO₄

态,下导带主要是 Ta5d 态,上导带主要是 Lu5d 态。

3.3 介电函数

为进一步研究 YTaO₄, LuTaO₄ 晶体中的电子态,计算了它们的介电函数($\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$)的实部 $\epsilon_1(\omega)$ 和虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 。图 5 为介电函数的虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 和实部 $\epsilon_1(\omega)$ 与光子能量的关系。YTaO₄ 晶体的静态介电常数为 5.1。介电函数的虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 上共有 6 个比较明显的特征峰。在 AWO₄ (A = Ca, Ba, Pb) 和 BMO₄ (B = Ca, Ba, Sr, Pb) 中,低能特征峰对应于阴离子基团的电子跃迁^[23~25]。由此可知,在 YTaO₄ 中,A 峰(6.75 eV)、B 峰(7.81 eV)、C 峰(9.96 eV)归因于 TaO₄³⁻ 基团的电子跃迁,对应于电子从 O2p 价带到 Ta5d 导带跃迁;D 峰(11.9 eV)归因于电子从 O2p 价带到 Y4d 上导带的跃迁;E 峰

(18.35 eV)、F 峰(22.63 eV)为高能特征峰,分别归因于内层电子从 O2s 到下导带和上导带的跃迁。LuTaO₄ 的静态介电常数为 5.0,与 YTaO₄ 的静态介电常数非常的相近,这是由于 Lu 和 Y 的最外层电子数相同,并且二者的原子电负性和原子半径都

非常接近的缘故。此外,从 YTaO₄ 和 LuTaO₄ 介电函数虚部来看,小于 10 eV 的特征峰的位置比较接近,这是因为这些特征峰对应的跃迁是相同的,都对应于 O2p 态到 Ta5d 态的跃迁。

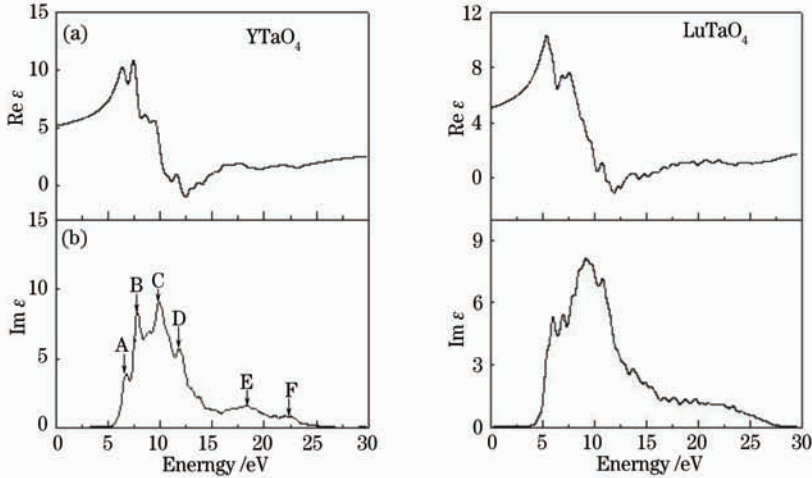


图 5 理论计算的 YTaO₄ (a), LuTaO₄ (b) 介电函数的实部(a)和虚部(b)

Fig. 5 Calculated real part (a) and imaginary part (b) of dielectric functions of YTaO₄, LuTaO₄

3.4 折射率

根据复折射率与复介电函数之间的关系,可以推导出折射率 $n(\omega)$, YTaO₄ 的计算结果如图 6(a) 所示。在 $\omega=0$ 时,折射率 $n=1.96$,这与计算的 LuTaO₄ 的折射率 1.98 非常接近,如图 6(b) 所示。由于材料的折射率与元素电负性、原子最外层电子

数和原子体积有关。比较 YTaO₄ 与 LuTaO₄ 的差异,只考虑 Lu 和 Y 原子对折射率造成的影响。事实上, Lu 原子与 Y 原子的最外层电子数相同,原子半径和电负性也非常接近,因此 Lu 和 Y 原子对两种材料折射率的影响应该差别不大,计算结果表明这两种材料的折射率确实非常接近。

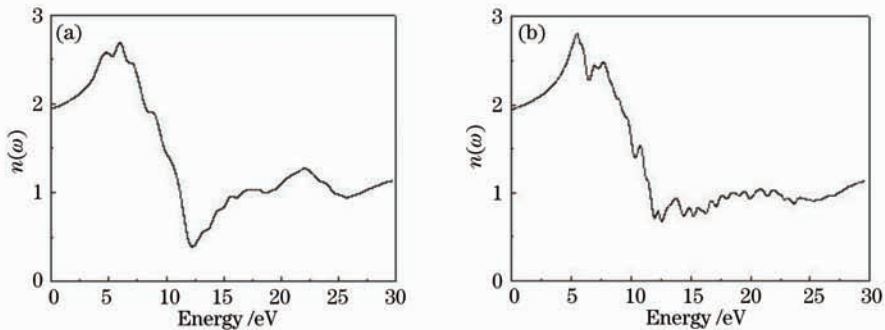


图 6 理论计算的 YTaO₄ (a), LuTaO₄ (b) 的折射率

Fig. 6 Calculated refraction index of YTaO₄ (a), LuTaO₄ (b)

3.5 吸收,发射和激发光谱

由介电函数可推得吸收系数,其结果如图 7 所示。YTaO₄、LuTaO₄ 吸收光谱在紫外区表现为宽而强的吸收带,此吸收带归属于从 O2p 到 Ta d⁰ 离子的电荷转移跃迁^[26]。一个电子从成键轨道(在氧离子上)激发到反键轨道(主要成分是 Ta 离子的 d 轨道)。因此在吸收光后,化学键被严重削弱, $\Delta R \gg 0$, 谱带宽度变大^[27]。此外,从计算的电子态密度上也

可以看出,价带和导带都比较宽,而吸收系数正比于价带态密度和导带态密度的卷积^[28],所以吸收光谱必然也很宽。YTaO₄ 晶体的激发谱、发射谱如图 8 所示^[7]。YTaO₄ 晶体的最强激发峰位于 225 nm, 对应 TaO₄³⁻ 基团的电荷转移跃迁激发,电子从 O2p 轨道被激发到空的 Ta5d 轨道^[29];在紫外光激发下, YTaO₄ 晶体在 335 nm 附近有带状发射,这是 TaO₄³⁻ 基团电荷转移的跃迁发射,这个发射带与

Eu^{3+} 的 $f-f$ 跃迁激发谱有重叠, 所以能够传递能量给 Eu^{3+} 。在 TaO_4^{3-} 基团的激发和发射之间产生

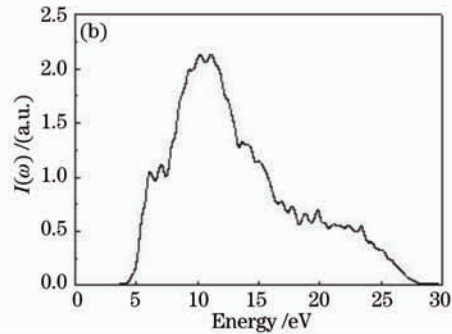
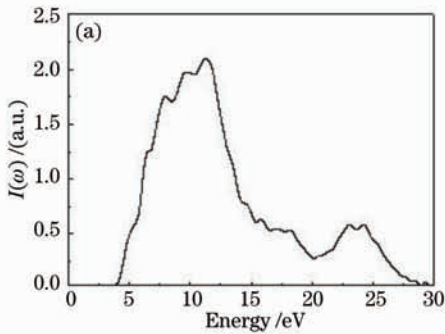


图 7 理论计算的 YTaO_4 (a), LuTaO_4 (b) 的吸收光谱

Fig. 7 Calculated absorption spectra of YTaO_4 (a), LuTaO_4 (b)

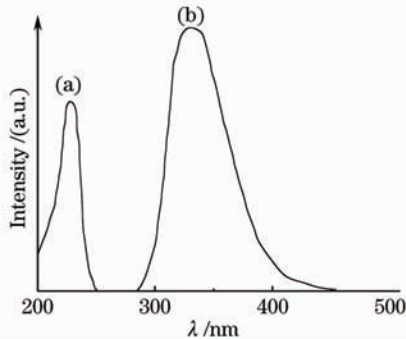


图 8 室温下实验测得的 YTaO_4 的激发谱(a), 发射谱(b)

Fig. 8 Excitation (a), emission (b) spectra of YTaO_4 measured in experiment at room temperature

4 结 论

基于第一性原理的赝势平面波方法对 YTaO_4 , LuTaO_4 晶体的电子结构和光学性质进行计算。对晶胞进行了结构优化, 晶格常数理论值与实验值符合的较好; 计算了 YTaO_4 , LuTaO_4 晶体的能带结构, 结果显示 YTaO_4 晶体属间接带隙材料, 价带主要由 $\text{O}2p$ 态组成, 导带主要来源于 Ta 的 $5d$ 态和 Y 的 $4d$ 态; LuTaO_4 价带中除 $\text{O}2p$ 态外还包含了 Lu 的 $4f$ 态, 导带来源于 Ta $5d$ 态和 Lu $5d$ 态。计算了 YTaO_4 , LuTaO_4 晶体的介电函数、折射率、吸收光谱等。介电函数虚部中小于 10.0 eV 的特征峰对应于 TaO_4^{3-} 基团的电子跃迁, 而 10.0~15.0 eV 之间的特征峰对应于 $\text{O}2p$ 态到上导带的跃迁, 高于 15.0 eV 的特征峰则归因于 $\text{O}2s$ 态到导带的跃迁。两种晶体的折射率也非常接近。两者在紫外区的吸收带宽而强, 此吸收带归属于从 $\text{O}2p$ 到 Tad^0 离子的电荷转移跃迁。

了 1.6 eV 的 Stokes 位移。Stokes 位移的产生可以从位形坐标模型得到解释。

参 考 文 献

- G. Blasse, L. H. Brixner. Ultraviolet emission from ABO_4 -type niobates, tantalates and tungstates [J]. *Chem. Phys. Lett.*, 1990, **173**(5~6): 409~411
- D. B. Hedden, C. C. Torardi, W. J. Zegarski. $\text{M}'\text{-RTaO}_4$ synthesis: activation of the precursor oxides by the reaction flux [J]. *Solid State Chem.*, 1995, **118**(2): 419~421
- G. M. Wolten. The structure of the M' -phase of YTaO_4 , a third fergusonite polymorph [J]. *Acta Cryst.*, 1967, **23**: 939~944
- L. H. Brixner, H. Y. Chen. On the structural and luminescent properties of the M' LuTaO_4 rare earth tantalates [J]. *J. Electrochem. Soc.*, 1983, **130**(12): 2435~2443
- G. Blasse, A. Brial. Luminescence phenomena in compounds with fergusonite structure [J]. *J. Lumin.*, 1970, **3**: 109~131
- Li Bo, Gu Zhennan, Lin Jianhua *et al.*. Luminescence properties of $\text{YTaO}_4:\text{Nb}$, Eu [J]. *Chem. J. Ch. U.*, 2001, **22**(1): 1~5
李 博, 顾镇南, 林建华 等. $\text{YTaO}_4:\text{Nb}$, Eu 的发光性能研究 [J]. *高等学校化学学报*, 2001, **22**(1): 1~5
- Li Bo, Gu Zhennan, Dong Yi *et al.*. The luminescence properties of M' type of $\text{YTaO}_4:\text{Eu}$ [J]. *Chem. Res. Ch.*, 1999, **15**(3): 226~231
- S. Cabuk, H. Akkus, A. M. Mamedov. Electronic and optical properties of $\text{KTaO}_3:\text{Ab}$ initio calculation [J]. *Physica B*, 2007, **394**(1): 81~85
- Shigemi Kohiki, Masao Arai, Hideki Yoshikawa *et al.*. Electron-energy-loss function of LiTaO_3 and LiNbO_3 by X-ray photoemission spectroscopy: Theory and experiment [J]. *Phys. Rev. B*, 1998, **57**(23): 14572~14575
- Iris Inbar, R. E. Cohen. Comparison of the electronic structures and energetics of ferroelectric LiNbO_3 and LiTaO_3 [J]. *Phys. Rev. B*, 1996, **53**(3): 1193~1204
- A. Mamedov. The energy loss spectroscopy of ABO_3 ferroelectrics [J]. *J. Elec. Spec.*, 1996, **79**: 75~78
- Zhang Jun, Han Shengyuan, Lu Guiwu *et al.*. Calculation for electronic structure and optical properties of LiNbO_3 crystals [J]. *Chinese J. Lasers*, 2007, **34**(9): 1227~1231
张 军, 韩胜元, 卢贵武 等. 铌酸锂晶体电子结构和光学性质计算 [J]. *中国激光*, 2007, **34**(9): 1227~1231
- X. Gonze, J. M. Beuken, R. Caracas *et al.*. First-principles computation of material properties: the ABINIT software project [J]. *Comput. Mater. Sci.*, 2002, **25**(3): 478~492
- http://www.abinit.org
- J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77**(18): 3865~3868

- 16 M. Fuchs, M. Scheffler. Ab initio pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density-functional theory[J]. *Comput. Phys. Commun.*, 1999, **119**(1): 67~98
- 17 Yingkai Zhang, Weitao Yang. Comment on "Generalized gradient approximation made simple" [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **80**(4): 890~893
- 18 B. Hammer, L. B. Hansen, J. K. Norskov. Improved adsorption energetics within density-functional theory using revised Perdew-Burke-Ernzerhof functionals [J]. *Phys. Rev. B*, 1999, **59**(11): 7413~7421
- 19 W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky *et al.*. *Numerical Recipes, the Art of Scientific Computing* (Fortran Version) [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1986. 308~311
- 20 W. Frederick. *Optical Properties of Solids* [M]. New York: Academic Press, 2002. 199~200
- 21 Fang Rongchuan. *Solid State Spectroscopy* [M]. Hefei: China Science and Technology University Press, 2001. 39~50
方容川. *固体光谱学* [M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2003. 39~50
- 22 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
- 23 I. A. Kamenskikh, V. N. Kolobanova, V. V. Mikhailin *et al.*. Optical and luminescent properties of anisotropic tungstate crystals[J]. *Nuclear Instrum. Methods A*, 2002, **486**(1~2): 496~503
- 24 D. Spassky, S. Ivanov, I. Kitaeva *et al.*. Optical and luminescent properties of a series of molybdatesingle crystals of scheelite crystal structure[J]. *Phys. Stat. Sol.*, 2005, **2**(1): 65~68
- 25 Dmitry A. Spassky, Sergey N. Ivanov, Vitaly N. Kolobanov *et al.*. Optical and luminescent properties of the lead and barium molybdates[J]. *Radiation Measurements*, 2004, **38**(4~6): 607~610
- 26 G. Blasse. The luminescence of closed-shell transition-metal complexes. New developments [J]. *Structure and Bonding*, 1980, **42**: 1~42
- 27 Sun Jiayue, Du Haiyan, Hu Wenxiang. *Solid Luminescent Materials* [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2003. 70~71
孙家跃, 杜海燕, 胡文祥. *固体发光材料* [M]. 北京: 化学工业出版社, 2003. 70~71
- 28 Fang Rongchuan. *Solid State Spectroscopy* [M]. Hefei: China Science and Technology University Press, 2003. 59
方容川. *固体光谱学* [M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2003. 59
- 29 J. T. Waber, D. T. Cromer. Orbital radii of atoms and ions[J]. *J. Chem. Phys.*, 1965, **42**(12): 4116~4123