

文章编号: 0253-2239(2009)04-1032-06

Ga₂As_n 离子团簇结构及其光电子能谱研究

马德明 施 卫 李恩玲 侯利平 戴元滨

(西安理工大学理学院, 陕西 西安 710048)

摘要 利用密度泛函理论中 B3LYP 方法, 在 6-311G(d) 基组上对 Ga₂As_n (n=1-5) 阴阳离子团簇的几何结构和光电子能谱进行了系统研究。结果得到了各团簇的最稳定结构, 在 Ga₂As_n (n=1-5) 阴阳离子团簇中, 稳定性随着总原子数的增大而呈奇偶变化规律, 对于 Ga₂As_n⁻ 团簇, 总原子数为奇数的团簇比原子数为偶数的团簇稳定; 对于 Ga₂As_n⁺ 团簇, 总原子数为偶数的团簇比原子数为奇数的团簇稳定。团簇的最高占据轨道(HOMO)和最低空轨道(LUMO)能级之间的能隙随 As 原子数的增大而呈现奇偶交替变化规律, 当 As 原子数为偶数时, 中性团簇及其阴阳离子团簇的基本相同, 当 As 原子数为奇数时, 它们差异较大。

关键词 离子团簇; 密度泛函理论; 结构与稳定性; 光电子能谱

中图分类号 O561 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS20092904.1032

Structure and Photoelectron Energy Spectrum of Ga₂As_n Ion Clusters

Ma Deming Shi Wei Li Enling Hou Liping Dai Yuanbin

(Science School, Xi'an University of Technology, Xi'an, Shaanxi 710048, China)

Abstract The method of B3LYP/6-311G(d) in density functional theory (DET) was used to optimize the geometric configuration and study the photoelectron energy spectrum of Ga₂As_n (n=1-5) ion clusters. The ground-state structure of the clusters has been obtained, the stability of which shows a certain degree of even/odd alternation with the increase of the total atoms number. The structure with odd number of total atoms is more stable than those with even number of total atoms in Ga₂As_n⁻ clusters, while it is quite the contrary in Ga₂As_n⁺ clusters. The energy gap between the highest-occupied molecular orbital (HOMO) and the lowest-unoccupied molecular orbital (LUMO) displays a certain degree of even/odd alternation, with the increase of the arsenic atoms number. The energy gap values with even number of arsenic atoms are basically the same, but they are rather different with odd number of arsenic atoms.

Key words ion cluster; density functional theory; structure and stability; photoelectron energy spectrum

1 引 言

半导体团簇在科学和技术上的广泛应用价值^[1], 使得半导体中性和离子团簇在过去十多年里成为人们研究非常活跃的领域之一。用理论方法系统地研究团簇的物理和化学性质具有很大的挑战性, 特别是像砷化镓(GaAs)这样的混合型团簇, 即使只包含少数几个原子, 由于其几何构型上组合的复杂性, 要全局搜索其基态结构仍有较大难度。然而, 近年研究者通过巨大的努力, 对它们的理论和实

验研究也取得了一些进展。Song 等^[2,3]用从头计算分子轨道动力学方法研究了 Ga₄As₄ 中性团簇的结构和稳定性; Lou 等^[4]用第一性原理研究了 Ga₅As₅ 团簇的结构; Vasiliev 等^[5]在局域密度近似框架下用随时间变化的密度泛函理论研究了 Ga₄As₄ 和 Ga₅As₅ 团簇结构的吸收谱; Mohammad 等^[6]研究认为 Ga₃As₃ 的基态结构是带帽的立方双锥体; 赵卫等^[7-10]用全势能线性糕模轨道分子动力学方法计算了 Ga_nAs_n (n=4, 5, 6, 8) 团簇结构, 发现 Ga_nAs_n

收稿日期: 2008-09-17; 收到修改稿日期: 2008-11-23

基金项目: 国家 973 计划(2007CB310406)、国家自然科学基金(50837005, 10876026, 10876025)和西安理工大学创新基金(108-210705)资助课题。

作者简介: 马德明(1971-), 男, 讲师, 博士研究生, 主要从事光电材料与器件等方面的研究。

E-mail: mademing@xaut.edu.cn

导师简介: 施 卫(1957-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事超快光电物理与技术等方面的研究。

E-mail: swshi@mail.xaut.edu.cn

($n=5, 6, 8$)已经表现出半导体性质; Taylor 等^[11]对 Ga_2As_2^- 和 Ga_3As_3^- 负离子团簇光电子能谱进行了研究。Smally 等^[12,13] 最早在实验上产生了 Ga_mAs_n ($m+n>10$)中性团簇及其阳离子团簇; 这些研究绝大部分都涉及到 Ga_nAs_n 团簇(Ga 原子数目和 As 原子数相等), 对 Ga 和 As 原子数不等的团簇研究还较少, 但在 GaAs 团簇形成过程中同样会产生 Ga 和 As 原子数不等的团簇, 它们有同样的重要性。Liao 等^[14] 对 Ga_3As_2 和 Ga_2As_3 团簇基态结构进行了比较; Kwong 等^[15] 研究了 $\text{Ga}_n\text{As}_{10-n}$ ($n=0-10$)团簇的结构, 认为这些团簇的结构随组份的变化而变化。富砷离子团簇的系统研究相对较少, 至今尚未见 Ga_2As_n 离子团簇系统的研究报道。

密度泛函理论已成功用于计算分子的结构和光电子特性^[16,17]。本文在前期研究富砷中性团簇结构和 SiN 离子团簇的基础上^[18,19], 用密度泛函理论中的 B3LYP 方法, 在 $6-311\text{G}(\text{d})$ 基组上对 Ga_2As_n ($n=1-5$) 阴阳离子团簇进行了计算, 并对各种结构进行了优化和频率分析, 得到了这些团簇的基态

和亚稳态结构及其光电子能谱, 为人们系统认识富砷离子团簇的结构及其稳定性规律提供了依据。

2 计算方法

在 Dell 工作站上使用 Gaussian03 程序进行计算, 采用密度泛函理论中的 B3LYP 方法, 在 $6-311\text{G}(\text{d})$ 基组上, 对 Ga_2As_n ($n=1-5$) 阴阳离子团簇的各种可能结构进行几何构型优化; 为了确定得到的构型是势能面上的极小点, 在相同水平上对振动频率进行了计算, 并分析了所得 Ga_2As_n 阴阳离子团簇结构的稳定性。

3 结果与讨论

3.1 几何结构

Ga_2As_n ($n=1-5$) 阴阳离子团簇基态和亚稳态的几何构型如图 1 所示, 其中(a)为基态构型, (b)为亚稳态构型, 图中深色和浅色小球分别表示 Ga 原子和 As 原子。表 1 给出了基态结构的几何参数。

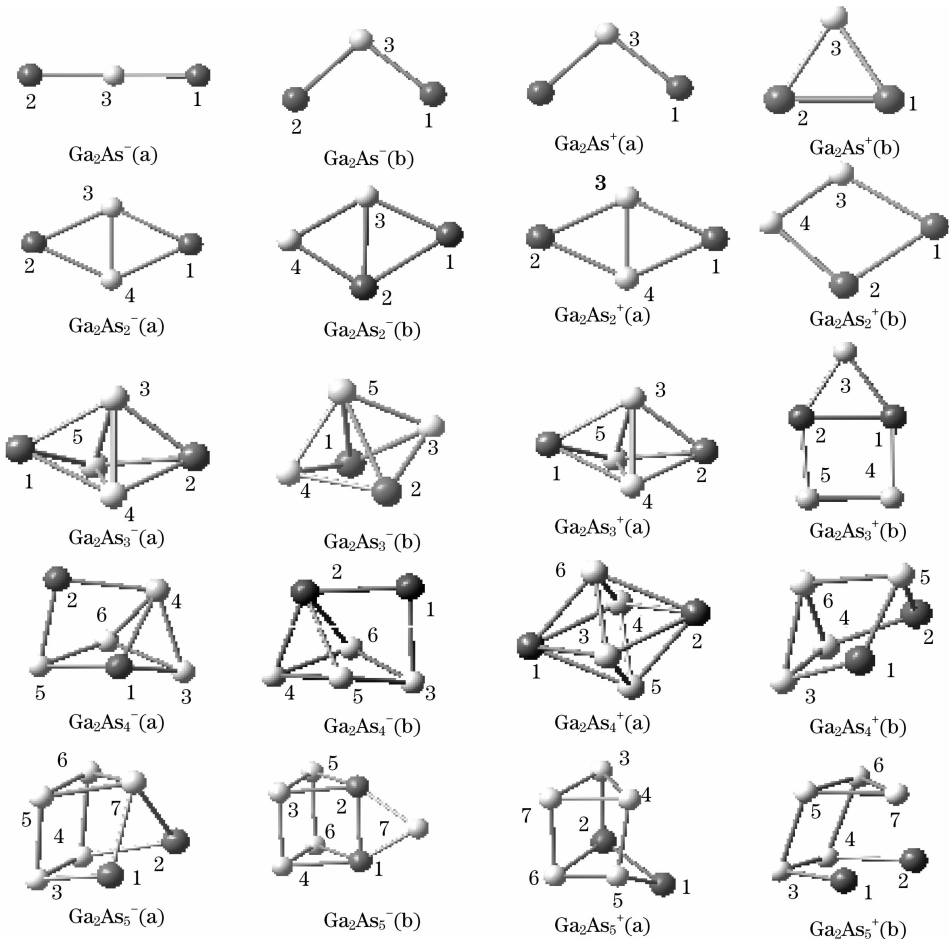


图 1 团簇的几何构型

Fig. 1 Geometric structures of clusters

计算过程中对各团簇的总能量,最高占据轨道(HOMO)和最低空轨道(LUMO)的能级以及两者之间的能隙差(E_{gap})进行了计算。根据能量最低原理,总能量的高低可以反映团簇的稳定性;而LUMO能级和HOMO能级可以反映团簇分子得失电子的能力,LUMO能级越低,该物质越易得到电子,HOMO能级越高,该物质越易失去电子。

HOMO能级和LUMO能级的差值大小则反映了电子从占据轨道向空轨道发生跃迁的能力,即分子参与化学反应的能力,能级差 E_{gap} 是半导体材料特性研究的重要参数。表2给出了 Ga_2As_n ($n=1\sim 5$)正负离子团簇基态结构的总能量、零点能、能隙、热容和熵。

表1 Ga_2As_n^- 和 Ga_2As_n^+ ($n=1-5$)团簇基态结构的几何参数

Table 1 Optimized geometric parameters for ground-state structures of Ga_2As_n^- and Ga_2As_n^+ ($n=1-5$) clusters

Cluster	Symmetry	Bond lengths /nm		Cluster	Symmetry	Bond lengths /nm	
Ga_2As^-	$C_{\infty v}$	1-3	0.2312	Ga_2As_2^+	D_{2h}	1-3	0.2551
		2-3	0.2312			1-4	0.2551
Ga_2As_2^-	C_s	1-3	0.2470	Ga_2As_3^+	C_s	3-4	0.2370
		2-4	0.2610			1-3	0.2476
		3-4	0.2693			1-4	0.2476
Ga_2As_3^-	C_s	1-3	0.2684	Ga_2As_4^+	D_{2h}	1-5	0.2476
		1-4	0.2684			3-4	0.2640
		1-5	0.2684			3-5	0.2640
		3-4	0.2460			4-5	0.2640
		3-5	0.2460			1-3	0.2769
		4-5	0.2460			1-5	0.2769
Ga_2As_4^-	C_1	1-3	0.2510	Ga_2As_5^+	C_1	1-4	0.2769
		1-5	0.2540			1-6	0.2769
		1-4	0.2760			3-5	0.2450
		2-4	0.2741			3-6	0.2450
		2-5	0.2590			4-6	0.2450
		3-4	0.2470			5-6	0.2450
		3-6	0.2420			1-2	0.2520
		4-6	0.2500			1-5	0.2500
Ga_2As_5^-	C_s	5-6	0.2450	2-3	0.2370		
		1-3	0.2674	2-6	0.2510		
		1-7	0.2674	3-4	0.2540		
		3-4	0.2420	3-7	0.2420		
		3-5	0.2440	4-7	0.2470		
		5-6	0.2480	4-5	0.2576		
Ga_2As^+	C_{2v}	5-7	0.2550	5-6	0.2390		
		1-3	0.2336	6-7	0.2576		

表2 Ga_2As_n^- 和 Ga_2As_n^+ ($n=1-5$)团簇的参数

Table 2 Parameters of Ga_2As_n^- and Ga_2As_n^+ ($n=1-5$) clusters

Cluster	Symmetry	Total energy /eV	Zero-point energy / (kJ · mol ⁻¹)	Energy gap /eV	Thermal capacity / (J · mol ⁻¹ · K ⁻¹)	Standard entropy / (J · mol ⁻¹ · K ⁻¹)
Ga_2As^-	$C_{\infty v}$	-6079.7223	3.837	2.917	51.389	321.317
Ga_2As_2^-	C_s	-8313.5152	5.430	2.313	63.599	351.463
Ga_2As_3^-	C_s	-10547.3754	9.413	4.055	94.773	391.436
Ga_2As_4^-	C_1	-12781.1494	12.220	2.778	118.566	455.449
Ga_2As_5^-	C_s	-15014.9679	14.944	2.535	142.103	494.678
Ga_2As^+	C_{2v}	-6079.3428	2.312	0.871	48.756	334.245
Ga_2As_2^+	D_{2h}	-8313.1967	6.048	2.449	71.679	366.314
Ga_2As_3^+	C_s	-10547.0158	10.425	2.721	94.188	391.436
Ga_2As_4^+	D_{2h}	-12780.8424	11.792	2.931	118.411	451.122
Ga_2As_5^+	C_1	-15014.6514	16.425	2.734	140.761	481.586

3.1.1 Ga_2As_n ($n=1-5$) 的负离子团簇的几何结构

Ga_2As^- : 基态结构如图 1 中 Ga_2As^- (a) 所示, 为 $C_{\infty v}$ 对称的直线型结构, 键长为 0.2312 nm。亚稳态结构如图 1 中 Ga_2As^- (b) 所示, 为 C_{2v} 对称的三角结构, 键长为 0.2310 nm, 总能量为 -6079.7221 eV, 与基态相比, 虽然结构不同, 但总能量相差不大。

Ga_2As_2^- : 基态结构如图 1 中 Ga_2As_2^- (a) 所示, 是具有 C_s 对称性的菱形结构, 含有四个 Ga-As 键和一个 Ga-Ga 键。亚稳态结构是具有 D_{2h} 对称性的菱形结构, 如图 1 中 Ga_2As_2^- (b) 所示, 与基态不同的是少了一个 Ga-As 键, 多了一个 As-As 键。亚稳态构型总能量为 8313.5097 eV, 比基态能量高 0.055 eV。

Ga_2As_3^- : 基态结构是具有 C_s 对称性的立体结构, 如图 1 中 Ga_2As_3^- (a) 所示, 由三个 As 原子组成三角形, 两个 Ga 各处于三角形两侧, 形成以 Ga 原子为顶, As 原子为底的两个锥形体空间结构, 其中含有六个键长相等的 Ga-As 键和三个键长相等的 As-As。亚稳态结构如图 1 中 Ga_2As_3^- (b) 所示, 是具有 C_s 对称性的立体结构, 其中含有 6 个 Ga-As 键和两个 As-As 键, 总能量为 -10547.3647 eV, 比基态能量高 0.0107 eV。

Ga_2As_4^- : 基态为具有 C_1 对称性的立体结构, 如图 1 中 Ga_2As_4^- (a) 所示, 含有 5 个 Ga-As 键和 4 个 As-As 键。亚稳态结构如图 1 中 Ga_2As_4^- (b) 所示, 是具有 C_s 对称性的立体结构, 与基态相比, 少了一个 Ga-As 键, 多了一个 Ga-Ga 键。

Ga_2As_5^- : 基态结构为具有 C_s 对称性的立体结构, 如图 1 中 Ga_2As_5^- (a) 所示, 它含有 6 个 As-As 键和 4 个 Ga-As 键。亚稳态结构为具有 C_{2v} 对称性的空间结构, 如图 1 中 Ga_2As_5^- (b) 所示, 由四个 As 原子形成的矩形与两个 Ga 原子组成对称的三角柱体, 另一个 As 原子和两个 Ga 原子连接成键。亚稳态构型的总能量是 -15014.9235 eV, 比基态能量高 0.0462 eV。

3.1.2 Ga_2As_n ($n=1-5$) 的正离子团簇的几何结构

Ga_2As^+ : 基态结构如图 1 中 Ga_2As^+ (a) 所示, 是具有 C_{2v} 对称性的三角结构, 与阴离子团簇的亚稳态结构相似, 其中两个 Ga-As 键键长相等。亚稳态结构如图 1 中 Ga_2As^+ (b) 所示, 是具有 C_s 对称性的三角形结构, 与基态相比, 多了一个 Ga-Ga 键。

Ga_2As_2^+ : 基态结构是具有 D_{2h} 对称性的菱形结

构, 如图 1 中 Ga_2As_2^+ (a) 所示, 包含四个键长相等的 Ga-As 键和一个 As-As 键。亚稳态结构如图 1 中 Ga_2As_2^+ (b) 所示, 也是具有 D_{2h} 对称性的菱形结构, 但结构中原子位置和成键有所不同, 包含了两个 Ga-As 键和一个 As-As, 另外还有一个 Ga-Ga 键, 其总能量为 -8313.1942 eV, 比基态能量高 0.0025 eV。

Ga_2As_3^+ : 基态结构为具有 C_s 对称性的立体结构, 如图 1 中 Ga_2As_3^+ (a) 所示, 与阴离子团簇基态结构相似, 由三个 As 原子组成三角形, 两个 Ga 各处于三角形两侧, 形成以 Ga 原子为顶, As 原子为底的两个锥形体空间结构, 其中含有六个键长相等的 Ga-As 键和三个键长相等的 As-As 键。与阴离子团簇不同的是 As-As 键键长增大, Ga-As 键键长减小。亚稳态结构如图 1 中 Ga_2As_3^+ (b) 所示, 是具有 C_{2v} 对称性的平面结构, 含有 4 个 Ga-As 键、1 个 As-As 键和一个 Ga-Ga 键, 总能量为 -10546.9940 eV, 比基态能量高 0.0218 eV。

Ga_2As_4^+ : 基态结构如图 1 中 Ga_2As_4^+ (a) 所示, 两个 Ga 原子分别位于四个 As 围成四边形的两侧, 形成具有 D_{2h} 对称性的立体结构, 包含了 8 个键长相等的 Ga-As 键和 4 个键长相等的 As-As 键。而亚稳态结构是具有 C_1 对称性的立体结构, 如图 1 中 Ga_2As_4^+ (b) 所示, 包含四个 Ga-As 键和四个键长不等的 As-As 键。亚稳态的总能量为 -12780.8278 eV, 比基态能量大 0.0146 eV。

Ga_2As_5^+ : 基态结构是具有 C_1 对称性的立体结构, 如图 1 中 Ga_2As_5^+ (a) 所示, 包含 6 个 As-As 键、2 个 Ga-As 键和 1 个 Ga-Ga 键。亚稳态结构是对称性为 C_s 的空间结构, 如图 1 中 Ga_2As_5^+ (b) 所示, 与负离子团簇的基态结构原子分布相似, 所不同的是少了 1-7 和 2-7 两个 Ga-As 键。亚稳态结构的总能量为 -15014.6193 eV, 比基态能量高 0.0311 eV。

3.2 离子团簇振动能谱

表 3 给出了团簇的光电子谐振频率, 括号中给出了相应振动模式及强度, 强度最大的振动频率可以反映红外光谱中最强吸收峰的位置 (表 3 中 Frequency 对应前面的数据; Intensity 对应括号中的数据; pi, sg, a', b3u 等是振动模式), 最小振动频率可以反应所得结构是否存在虚频。从表 3 中可以看出各团簇的振动频率均为正值, 表明团簇结构均为势能面上的极小点, 保证其能量的二阶导数矩阵的本征值为正值, 相应结构稳定。计算出各团簇的光电子振动频率可以作为在实验上表征相应分子的依据。

表 3 Ga_2As_n^- 和 Ga_2As_n^+ ($n=1-5$) 团簇基态结构的振动频率和红外谱强度Table 3 Vibrational frequencies and IR intensities of possible ground states of Ga_2As_n^- and Ga_2As_n^+ ($n=1-5$) clusters

Structure	Frequencies/ cm^{-1} [IR intensities/(km/mol)]
Ga_2As^-	28.67 (pi)[0.06], 29.98(pi)[0.04], 222.07(sg)[2.00], 361.71(sg)[127.03]
Ga_2As_2^-	42.27(b3u)[0.60], 97.63(b2u)[0.30], 156.23(b3g)[10.04], 195.86(ag)[4.05], 231.79(b1u)[8.35], 292.50(ag)[1.46]
Ga_2As_3^-	80.56(a'')[0.61], 80.88(a')[0.61], 203.64(a')[30.52], 237.08(a)[0.41], 237.11(a)[0.40]
Ga_2As_4^-	74.54(a) [0.87], 83.26(a) [0.78], 116.40(a) [1.32], 126.95(a) [0.74], 139.55(a) [0.05], 168.48(a) [5.09], 178.39(a) [5.77], 193.12(a) [1.19], 208.54(a) [1.69], 221.21(a) [1.34], 245.73(a) [2.25], 288.79(a) [2.07]
Ga_2As_5^-	40.80(a'') [1.64], 73.04(a') [0.03], 100.09(a'') [0.26], 120.49(a'') [0.53], 123.51(a') [1.24], 149.08(a') [0.64], 155.73(a'') [11.45], 157.19(a'') [1.07], 162.27(a') [8.80], 184.47(a'') [0.05], 199.60(a') [0.73], 244.16(a'') [0.01], 248.87(a) [1.52], 264.63(a') [0.26], 276.94(a') [1.35]
Ga_2As^+	28.84(a1)[0.08], 124.70(b2)[9.83], 233.31(a1)[1.16]
Ga_2As_2^+	71.48(b3u)[1.20], 115.61(b2u)[1.01], 145.56(b1u)[11.74]
Ga_2As_3^+	118.01(a1)[1.65], 118.20(b1)[1.65], 192.11(b2)[0.15], 225.74(b)[0.27], 225.76(b)[0.27]
Ga_2As_4^+	57.65(eu) [0.54], 91.84(a2u) [10.56], 253.26(eu) [1.11]
Ga_2As_5^+	58.88(a)[0.28], 74.67(a)[0.52], 116.69(a)[2.77], 119.91(a) [1.99], 133.58(a) [0.52], 165.41(a) [0.90], 175.98(a) [0.52], 184.52(a) [0.88], 198.77(a) [0.57], 211.58(a) [0.54], 222.09(a) [1.07], 228.16(a) [0.63], 276.08(a) [1.25], 279.55(a) [0.83], 302.87(a) [0.38]

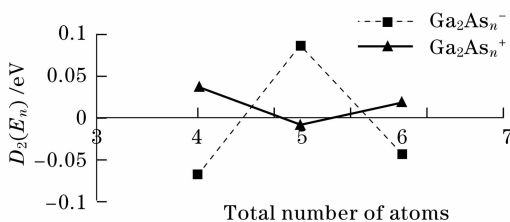
3.3 团簇稳定性的研究

为了进一步验证 Ga_2As_n ($n=1-5$) 离子团簇基态的稳定性, 利用公式

$$2(\text{Ga}_2\text{As}_n) \rightarrow (\text{Ga}_2\text{As}_{n+1}) + (\text{Ga}_2\text{As}_{n-1})$$

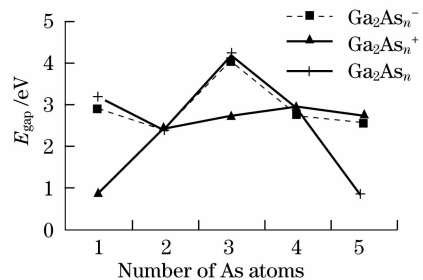
定义 $D_2(E_n) = E_{n+1} + E_{n-1} - 2E_n$ 为 Ga_2As_n 团簇能量二次差分值, 其中 E_{n-1} , E_n 和 E_{n+1} 分别为 Ga_2As_n , $\text{Ga}_2\text{As}_{n-1}$ 和 $\text{Ga}_2\text{As}_{n+1}$ 阴阳离子团簇的总能量。

由上式可以得到图 2 所示的曲线。对于 $D_2(E_n)$ 来说, 其数值越大, 簇合物稳定性越高。从图 2 可以看出, 随着总原子数的增大, Ga_2As_n ($n=1-5$) 离子团簇能量二次差分值呈奇偶变化, 且正负离子团簇的大小变化规律正好相反, 即离子团簇的稳定性随着总原子数的增大而呈奇偶变化规律, 总原子数为奇数的负离子团簇比总原子数为偶数的负离子团簇相对稳定, 相反地总原子数为偶数的正离子团簇比总原子数为奇数的正离子团簇相对稳定。

图 2 $D_2(E_n)$ 与总原子数的关系Fig. 2 Relation of $D_2(E_n)$ and total atomic numbers

为分析材料的光电特性, 计算了 Ga_2As_n ($n=$

1-5) 中性及其离子团簇的 HOMO 能级、LUMO 能级以及二者的能隙差 E_{gap} 。其中 E_{gap} 随 As 原子数的变化规律曲线如图 3 所示。从图中可以看出, 能隙差 E_{gap} 随着 As 原子数的增大而发生变化, 其大小大体呈现奇偶交替变化规律。其中当砷原子数为偶数时, 中性团簇及其正负离子团簇的 E_{gap} 基本相同, 当砷原子数为奇数时, 中性团簇与其正负离子团簇的 E_{gap} 变化较大, 且 $n < 4$ 时, 大致呈负离子团簇 $>$ 正离子团簇 $>$ 中性团簇, $n > 4$ 时, 刚好相反, 大致呈中性团簇 $>$ 正离子团簇 $>$ 负离子团簇。

图 3 E_{gap} 与 As 原子数的关系Fig. 3 Relation of E_{gap} and As atomic number

4 结 论

利用密度泛函理论中的 B3LYP 方法, 在 6-311G(d) 基组上对 Ga_2As_n ($n=1-5$) 阴阳离子团簇的几何结构、振动频率、能量和热力学性质进行了系统研究, 得到了各团簇的最稳定结构和光电子能谱。

团簇的稳定性随着总原子数的增大而呈奇偶变化规律,对于 Ga_2As_n^- 团簇,总原子数为奇数的团簇比原子数为偶数的团簇稳定;对于 Ga_2As_n^+ 团簇,总原子数为偶数的团簇比原子数为奇数的团簇稳定。团簇的最高占据轨道(HOMO)和最低空轨道(LUMO)能级之间的能隙差 E_{gap} 随 As 原子数的增大而呈现奇偶交替变化规律,当 As 原子数为偶数时,中性团簇及其阴阳离子团簇的 E_{gap} 基本相同,当 As 原子数为奇数时,它们差异较大。

参 考 文 献

- Howes M. J., Morgan D. V.. *Gallium Arsenide: Materials, Devices, and Circuits* [M]. New York: John Wiley & Sons Inc, 1985
- Song K. M., Ray A. K., Khowash P. K.. On the electronic structures of GaAs clusters [J]. *J. Phys. B*, 1994, **27**(8):1637~1648
- Al-Laham Mohammad A, Raghavachari Krishnan. Theoretical study of Ga_4As_4 , Al_4P_4 , and Mg_4Si_4 clusters [J]. *J. Chem. Phys.*, 1993, **98**(11): 8770~8776
- Lou L., Wang L., Chibante L. P. F *et al.*. Electronic structure of small GaAs clusters [J]. *J. Chem. Phys.*, 1991, **94**(12): 8015~8020
- Vasiliev Igor, Ögüt Serdar, Chelikowsky James R.. Ab initio absorption spectra of gallium arsenide clusters [J]. *Phys. Rev. B*, 1999, **60**(12): 8477~8480
- Al-Laham Mohammad A, Raghavachari Krishnan. Theoretical study of small gallium arsenide clusters [J]. *Chem. Phys. Lett.*, 1991, **187**(1~2):13~20
- Zhao Wei, Cao Peilin, Baoxing Li *et al.*. Study of the stable structures of Ga_4As_4 cluster using FP-LMTO MD method [J]. *Phys. Rev. B*, 2000, **62**(24):17138~17143
- Zhao Wei, Cao Peilin. Study of the structures of Ga_6As_6 cluster using FP-LMTO MD method [J]. *Phys. Lett. A*, 2001, **288**(1): 53~57
- Zhao Wei, Cao Peilin. Study of the stable structures of the Ga_5As_5 cluster using the full-potential linear-muffin-tin-orbital molecular-dynamics method [J]. *J. Physics: Condensed Matter*, 2002, **14**(1):33~43
- Zhao Wei, Cao Peilin, Duan Wenhui. Study of structure characteristics of the Ga_8As_8 cluster [J]. *Phys. Lett. A*, 2006, **349**(1~4):224~229
- Taylor Travis R, Go' mez Harry, Asmis Knut R *et al.*. Photoelectron spectroscopy of GaX^{2-} , Ga_2X^- , Ga_2X^{2-} , and Ga_2X^{3-} ($\text{X} = \text{P}, \text{As}$) [J]. *J. Chem. Phys.*, 2001, **115**(10): 4620~4631
- O'Brien S C, Liu Y, Zhang Q L *et al.*. Supersonic cluster beams of III-V semiconductors: Ga_xAs_y [J]. *J. Chem. Phys.*, 1986, **84**(7): 4074~4079
- Zhang Q L, Liu Y, Curl R F *et al.*. Photodissociation of semiconductor positive cluster ions [J]. *J. Chem. Phys.*, 1988, **88**(3): 1670~1677
- Liao M. Z., Dai D. G., Balasubramanian K. Electronic states of the Ga_3As_2 and Ga_2As_3 clusters [J]. *Chem. Phys. Lett.*, 1995, **239**(1):124~130
- Kwong H. H., Feng Y. P., Boo T. B.. Composition dependent properties of GaAs clusters [J]. *Computer Physics Communications*, 2001, **142**(1~3):290~294
- Xiao Qi, Qiu Guanzhou, Tan Wenqing *et al.*. Density functional calculation of electronic structure and optical properties of FeS_2 (pyrite) [J]. *Acta Optica Sinica*, 2002, **22**(12): 1501~1506
肖奇, 邱冠周, 覃文庆等. FeS_2 (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
- 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
- Ma Deming, Li Enling, Shi Wei *et al.*. Structures and stability of small Ga_mAs_n clusters [J]. *Journal of Atomic and Molecular Physics*, 2008, **25**(4): 984~990
马德明, 李恩玲, 施卫等. 密度泛函理论对 Ga_mAs_n 团簇的结构及稳定性的研究 [J]. *原子与分子物理学报*, 2008, **25**(4): 984~990
- Li Enling, Ma Deming, Ma Hong *et al.*. Study on structure and photoelectron spectroscopy about Si_{n-1}N and $\text{Si}_{n-2}\text{N}_2$ ($n=3\sim8$) ion clusters [J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(11): 1920~1928
李恩玲, 马德明, 马红等. Si_{n-1}N 和 $\text{Si}_{n-2}\text{N}_2$ ($n=3\sim8$) 离子团簇结构及其光电子能谱的研究 [J]. *光学学报*, 2007, **27**(11): 1920~1928