

文章编号: 0253-2239(2010)12-3580-06

Sr₂RuO₄ 各向异性光学性质的第一性原理研究

蔡建秋^{1,2} 陶向明² 罗海军^{1,2} 金清理¹ 黄运米¹

(¹温州大学物理与电子信息工程学院, 浙江 温州 325035; ²浙江大学理学院物理系, 浙江 杭州 310027)

摘要 基于密度泛函理论的第一性原理方法研究了超导体 Sr₂RuO₄ 各向异性的光学性质。考虑到温度效应对其光学性质的影响,在计算光学矩阵元时加入洛伦兹(Lorentz)展宽 $\delta=0.20$ eV。计算给出了 Sr₂RuO₄ 沿 c 方向和 x 方向的反射谱、光导谱及电子能量损失谱,并与实验很好地符合。由光导谱表明, Sr₂RuO₄ 的光学性质存在明显的各向异性,沿 x 方向的低能谱区形成了等离子体吸收峰,带内吸收和带间吸收的转换出现在 1.84 eV 左右,而沿 z 方向没有出现明显的等离子体吸收。进一步分析认为主要是由于两个方向上不同的能带色散结构引起的。

关键词 光电子学;光学性质;密度泛函;电子结构

中图分类号 TN304.2 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS20103012.3580

Ab-initio Investigation of Anisotropic Optical Properties of Sr₂RuO₄

Cai Jianqiu^{1,2} Tao Xiangming² Luo Haijun^{1,2} Jin Qingli¹ Huang Yunmi¹

¹College of Physics and Electronic Information Engineering, Wenzhou University,
Wenzhou, Zhejiang, 325035 China

²Department of Physics, College of Science, Zhejiang University, Hangzhou, Zhejiang 310027, China

Abstract The anisotropic optical properties for superconductor Sr₂RuO₄ have been studied by full-potential linearized augmented plane wave (FLAPW) method based on density functional theory. In order to simulate the temperature effects, Lorentzian broadening (set as $\delta=0.20$ eV) is added into optical matrix elements during the calculation in these spectra. The spectra of reflectivity $R(\omega)$, optical conductivity $\sigma(\omega)$ and electron energy loss have been calculated. These results consist quite well with experiments as a whole. And the optical conductivity spectrum along x -axis displays quite different features in comparison with that of z -axis. Along x -axis, $\sigma(\omega)$ spectrum shows an obvious Drude-like feature in low energy region while not along z -axis. The conversion between intra-band absorption and inter-band absorption appears at about 1.84 eV in the $\sigma(\omega)$ spectrum along x -axis. By further analysis, the anisotropy of optical properties should mainly arise from different band structure along two axes.

Key words optoelectronics; optical property; density functional theory; electronic structure

1 引言

过渡金属氧化物因其独特的结构和性质成为凝聚态物理研究领域中的新的研究热点^[1],例如铜氧化物的高温超导特性、钛酸盐的铁电性质、镍酸盐与亚锰酸盐中电子自旋、电荷和轨道之间的相互耦合等。过渡金属氧化物是非常典型的强关联体系,对于它的研究有助于加强对强关联体系的认识。钙钛矿结构的过渡金属氧化物在结构、磁性、输运和光电导等方面表现出许多新的特性^[2], Sr₂RuO₄ 是其中一种

比较有代表性的氧化物。自从 Maeno 等^[3]发现 Sr₂RuO₄ 具有超导特性以来,就因为其层状钙钛矿结构和不具有 Cu—O 面的特点而引起广泛的关注。Sr₂RuO₄ 具有与 La_{2-x}Ba_xCuO₄ 同样的晶体结构,对其超导来源的研究为确认当前已经建立的高温超导微观机制是否适用于其它的氧化物超导体提供了机会。

实验研究表明^[4~6],在常态下具有各向异性的电荷动力学是传统铜氧化物高温超导体的一个重要

收稿日期: 2009-11-02; 收到修改稿日期: 2010-03-16

基金项目: 浙江省教育厅科研项目(Y200804278)和浙江大学中央高校基本科研业务费专项基金(2009QNA3025)资助课题。

作者简介: 蔡建秋(1981—),男,硕士,讲师,主要从事电子结构和光学性质的计算方面的研究。

E-mail: cjqqu@wzu.edu.cn

特性。在低掺杂浓度下,平面内电阻率 ρ_{ab} 和平面间电阻率 ρ_c 展现出不同的温度变化特性:随着温度的降低 ρ_{ab} 逐渐减小而 ρ_c 则逐渐增加。而对 Sr_2RuO_4 单晶的电阻率测量实验表明, ρ_{ab} 随温度的降低逐渐减小,但 ρ_c 的变化在 130 K 以上则对复杂,而在 130 K 以下随温度降低迅速减小,与传统的高温超导体有所不同^[3~7]。近十多年对 Sr_2RuO_4 大量的研究确认了其超导特性的非传统本质,但是对其超导的微观来源仍有待解释。光学性质的分析^[8~12] 是研究强关联电子系统电子结构及物理性质的重要手段,它通过光的探针作用来研究固体的电子结构。其基本思想是通过光和电子的相互作用,把导带电子激发到各种低能量的末态,用光学测量和数据反演来研究固体电子能带结构。研究固体的光吸收可以直接获得有关电子能带结构、杂质缺陷态和原子振动等多方面信息。

对 Sr_2RuO_4 已有的光学实验研究表明^[13~17], 正常态下在 $\hbar\omega \sim 0$ eV 附近 c 轴的光导谱不存在 Drude 峰,而是随 ω 的减小而逐渐减小或保持常数;而超导态时低能谱权重主要集中于 $\hbar\omega \sim 0$ eV 附近,在 c 轴的远红外反射谱区形成了一个尖锐的等离子体边缘。Katsufuji 等^[18] 也通过实验对其各向异性的光学性质进行研究,给出了低能区平面内和平面外的光谱权重比约为 10^2 ,与铜氧化物的各向异性强度相当。Oguchi^[19] 利用基于密度泛函理论的线性化缀加平面波(LAPW)方法计算了其能带和电子结构,但并没有给出进一步的光学性质分析。鉴于 Sr_2RuO_4 具有与 $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ 类似的各向异性结构,对 Sr_2RuO_4 和铜氧化物的面间电荷动力学进行比较研究对理解强关联金属中各项异性的电荷动力学具有重要意义。为了从能带和电子结构的角度分析 Sr_2RuO_4 的光学性质,为实验提供强有力的理论佐证,并进一步寻找出更好的实验条件,采用第一性原理的计算方法研究了 Sr_2RuO_4 单晶的光导谱、反射谱及电子能量损失谱的系列结果,并基于能带和电子结构的计算进行进一步分析,同时将得到的数据与实验进行对比。

2 计算方法

所有计算都采用密度泛函理论的全电势线性化缀加平面波方法(FLAPW)的计算代码 WIEN2k^[20]。FLAPW 方法以 Kohn-Sham 密度泛函理论为基础,将晶胞划分为非重叠的 Muffin-tin 球区域和剩余的球间区域。在 Muffin-tin 球区域,电荷密度与势函数按球谐函数展开,基函数为原子径向和球谐部分的乘积;而在球间区,由于势场变化比较平缓,采用平面波来展开其电荷密度、势函数和基函数。交换关联能计算包含了由 Perdew, Burke 和 Ernzerhof 提出的广义梯度近似(GGA 96 或 GGA-PBE)^[21,22]。对布里渊区中波矢 k -空间的求和采用线性四面体积分法,自洽计算过程中使用的 k -空间取样点的网格化密度为 $20 \times 20 \times 16$ 。平面波展开到 $kR_{\max} = 8$,其中 k 为波矢量的大小, R_{\max} 为最大的原子球半径。 Sr_2RuO_4 具有类 K_2NiF_4 的晶体结构^[23],各原子坐标为: Sr $[0, 0, z(\text{Sr})]$; Ru $(0, 0, 1/2)$; O(I) $(0, 1/2, 0)$; O(II) $[0, 0, z(\text{O})]$ 。计算中使用的 Sr, Ru 和 O 原子的非接触原子球半径分别为 0.12, 0.10 和 0.09 nm,所采用的晶格常数^[24]则为 $a = 0.3875$ nm, $b = 0.3875$ nm, $c = 1.2734$ nm。在计算光学矩阵元时为了提高计算精确度,自洽计算中的 k -空间网格密度增加一倍,取为 $40 \times 40 \times 32$ 。

光电导率张量计算采用 Wang 等^[25]在 Kubo 的线性响应理论^[26]基础上提出的基本公式,将电子贡献的光电导率张量分解为带间跃迁和带内跃迁两部分,分别用 σ_{inter} 和 σ_{intra} 表示。

带内部分项通常用如下形式的 Drude 项表示:

$$\sigma_{\text{intra}}(\omega) = \frac{1}{4\pi} \frac{\omega_p^2 \tau_D}{1 - i\omega\tau_D}, \quad (1)$$

式中 ω_p 为等离子体频率, τ_D 为载流子寿命。 $\sigma_0 = \omega_p^2 \tau_D / 4\pi$ 为零频直流电导,通常可以由输运测量外推到绝对零温度得到。 $1/\tau_D$ 也称为 Drude 展宽,在计算时可以选取适当的值。

带间部分 σ_{inter} 则可以表示为

$$\left\{ \begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}_{\text{inter}})_{xx}(\omega) &= \frac{ie^2}{m^2 \hbar} \sum_k \sum_{l_1}^{\text{occ}} \sum_{n_2}^{\text{unocc}} \frac{1}{\omega_{n_2 l_1}(k)} \left[\frac{|\prod_{l_1 n_2}^x|^2}{\omega - \omega_{n_2 l_1}(k) + i\delta} + \frac{|\prod_{l_1 n_2}^x|^2}{\omega + \omega_{n_2 l_1}(k) + i\delta} \right], \\ (\boldsymbol{\sigma}_{\text{inter}})_{xy}(\omega) &= \frac{ie^2}{m^2 \hbar} \sum_k \sum_{l_1}^{\text{occ}} \sum_{n_2}^{\text{unocc}} \frac{1}{\omega_{n_2 l_1}(k)} \left[\frac{\prod_{l_1 n_2}^x \prod_{n_2 l_1}^y}{\omega - \omega_{n_2 l_1}(k) + i\delta} + \frac{(\prod_{l_1 n_2}^x \prod_{n_2 l_1}^y)^*}{\omega + \omega_{n_2 l_1}(k) + i\delta} \right], \end{aligned} \right. \quad (2)$$

$\prod_{n\sigma_2, l\sigma_1}$ 是正则动量算符在布洛赫 (Bloch) 态 (l, σ_1) 和 (n, σ_2) 之间的跃迁矩阵元:

$$\prod_{n\sigma_2, l\sigma_1}(k) = \int \psi_{nk\sigma_2}^*(r) \times \left\{ \mathbf{p} + \left(\frac{\hbar}{4mc^2} \right) [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(r)] \right\} \times \psi_{lk\sigma_1}(r) dr, \quad (3)$$

式中 $\psi_{nk\sigma_2}(r)$ 是布洛赫态波函数, 可由密度泛函计算得到, 而 (l, σ_1) 和 (n, σ_2) 分别为占据态 (occ) 和非占据态 (unocc) 的能带指标和自旋指标。 δ 为洛伦兹 (Lorentz) 展宽, 相当于数学中的 0^+ , 表示从正方向趋近于 0 的极限过程, 可以有效平滑计算结果, 从而便于和实验比较。

根据电磁学理论, 光电导率 $\sigma(\omega)$ 和复介电函数 $\epsilon(\omega)$ 通过下式联系起来:

$$\sigma(\omega) = -\frac{i\omega}{4\pi} [\epsilon(\omega) - 1], \quad (4)$$

同时, 复介电函数 $\epsilon(\omega)$ 和复折射率 $N(\omega)$ 满足简单的平方关系: $\epsilon(\omega) = N^2(\omega)$ 。实验上能够直接测量的物理量是反射率 R , 由反射光的强度和入射光强度之比率决定, 理论上它是复反射系数振幅 $\gamma(\omega)$ 的平方。复反射系数 $\gamma(\omega) \exp[i\theta(\omega)]$ [其中 $\theta(\omega)$ 为复反射系数的位相] 和复折射率 $N(\omega)$ 之间有下面的关系存在:

$$\gamma(\omega) \exp[i\theta(\omega)] = \frac{N(\omega) - 1}{N(\omega) + 1}, \quad (5)$$

也就是说, 根据第一性原理得到的布洛赫态, 由矩阵元的求和可以逐步得到代表固体的各种光学性质的物理量。同时, 根据由因果律导致的 Kramers-Kronig 关系, 可以得到同一个复光学系数, 例如复反射系数的振幅和相位之间就有如下的色散关系:

$$\theta(\omega) = \frac{\omega}{\pi} \text{P} \int_0^{\infty} \frac{\ln R(s) - \ln R(\omega)}{\omega^2 - s^2} ds, \quad (6)$$

式中 $R(\omega) = \gamma^2(\omega)$, 其中积分号前的大写 P 表示主值积分。

3 计算结果

图 1 给出了由密度泛函第一性原理计算得到的 Sr_2RuO_4 的反射谱。反射谱的计算结果表明, 在低能区域 ($0 \sim 2.17$ eV) 反射率 $R(\omega)$ 随着光子的能量增加迅速减小, 在 2.17 eV 附近形成带内跃迁和带间跃迁转换, 反射率出现最小值约为 12%。而后反射率逐渐增强, 在光子能量为 3.53 eV 和 4.22 eV 附近各有一个微弱的带间吸收峰。沿 z 方向 ($E \parallel c$) 的反射谱不存在类 Drude 特性, 而是形成了一个尖锐的等离子体边缘, 和沿 x 方向的反射谱存在着明显的不同, 这与两个方向上等离子体频率 (ω_p 分别为 4.31 eV 和 0.21 eV) 的巨大差异是对应的, 与实验结果完全一致。 z 方向上带内吸收与带间吸收的转换发生在 0.84 eV 附近, 总体上 z 方向的反射谱较为平缓, 只是在光子能量为 3.52 eV 和 5.19 eV 附近各呈现一个较弱的带间吸收峰。比较两条反射谱线可以发现, 在 2.0~5.0 eV 范围内, 带间跃迁及其变化较弱, 反射率低且反射谱显得较为平缓, 其中沿平面 x 方向反射率约为 15%, 沿 z 方向的反射率则保持在 22% 左右; 且在 1.87~6.00 eV 区域, 沿 z 方向的反射率始终大于 x 方向。以上计算结果和实验数据都得到了较好的吻合, 说明理论计算能够有效模拟以及预言 Sr_2RuO_4 的光学性质。

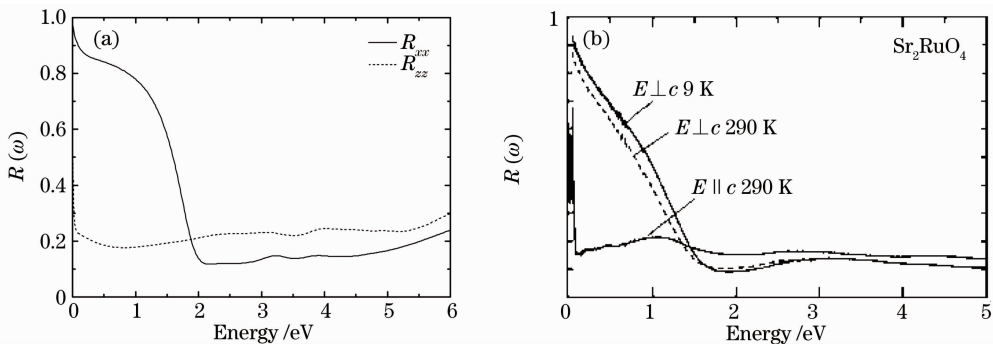


图 1 Sr_2RuO_4 沿 x 方向与沿 z 方向的反射谱。(a) 计算结果, (b) 实验结果

Fig. 1 Reflection spectra of Sr_2RuO_4 below 6 eV for $E \perp c$ and $E \parallel c$. (a) calculated result, (b) experimental result

图 2 为第一性原理计算得到的 Sr_2RuO_4 的光导谱。由光导谱可以看出, 沿平面 x 方向 ($E \perp c$) 的光导谱存在明显 Drude 峰结构, 等离子体共振吸收随光子能量增加快速衰减到几乎为零, 显示出明显

的金属性质。该方向的带内吸收和带间吸收的转换出现在 1.84 eV 左右, 此后光电导随光子能量增加总体呈现递增的趋势, 在光子的能量为 3.30 eV 和 4.03 eV 处各形成一个微弱的光导谱峰。和反射

谱的结果类似, z 方向的光导谱却和 x 方向表现出明显不同的行为: 低能区域不存在明显的等离子体吸收, 光电导处于一个很小的值且基本不变, 表明带内吸收和带间吸收都很弱, 而在光子能量超过 2 eV 后一定范围内光电导呈现出近乎线性的递增趋势, 可以认为 z 方向的光导谱存在类半导体的特性。光电导随光子能量递增过程中没有出现明显的吸收峰, 但在 3.3 eV 和 5.2 eV 附近形成平台或拐点。此外, 在实验结果的远红外光导谱区存在一个尖锐

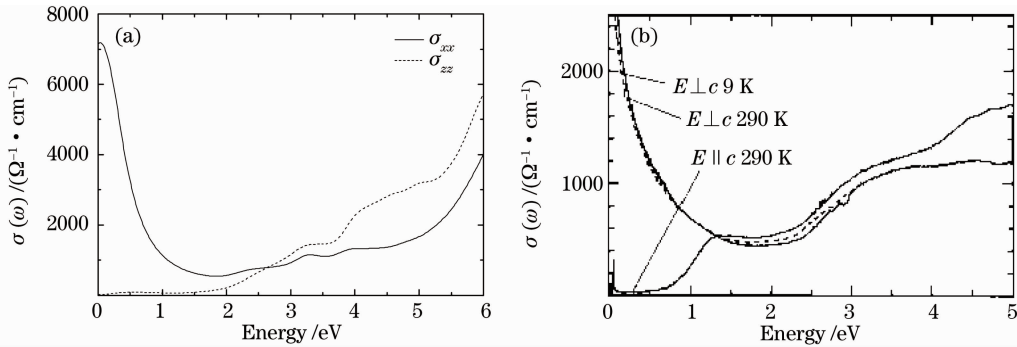


图 2 Sr_2RuO_4 的光导谱。(a) 计算结果, (b) 实验结果

Fig. 2 Optical conductivity $\sigma(\omega)$ spectra of Sr_2RuO_4 below 6 eV for $E \perp c$ and $E \parallel c$. (a) calculated result, (b) experimental result

与 Katsufuji 等^[18]的实验结果[图 2(b)]进行比较可以发现, 计算得到的反射谱和光导谱在两个方向上与实验结果都得到了很好的符合, 主要体现在以下几个方面。1) 谱峰的整体结构基本一致, 尤其是光导谱沿 z 方向都存在两个微弱的吸收峰, 而沿 x 方向都没有谱峰且只出现两个拐点或平台。2) 低能区域 x 方向存在等离子体吸收峰, 光导谱呈现类金属性, 而 z 方向没有。3) 沿 x 方向和沿 z 方向的谱线都存在一个交点。同时, 计算结果与实验的几点差异是值得注意的, 首先, 反射谱和光导谱沿 x 方向和沿 z 方向谱线交点的位置不同, 理论值分别为 1.87 eV 和 2.64 eV, 而实验值则为 1.4 eV 和 1.3 eV 左右。其次, 计算得到的光导谱中, 沿 x 方向出现的两个谱峰结构相对实验要更为明显一些, 且谱峰出现的位置 ($\hbar\omega = 3.52$ eV, 5.19 eV) 和间距也与实验存在一定差距, 这可能与实验样品中存在杂质及实验测量环境的影响有关。

此外, 基于密度泛函理论还计算了 Sr_2RuO_4 在 x 方向和 z 方向的能带结构和电子态密度, 结果与 Oguchi 采用标量相对论的 LAPW 方法和 Hedin-Lundqvist 交换关联自洽计算得到的结果^[19]是完全一致的。 Sr_2RuO_4 费米面附近的能带主要由 Ru d 和 O p 轨道杂化形成, 其中 3 个由 Ru d_{xy} , yz ,

的吸收峰, 在计算结果中则没有出现。这是由于远红外光导谱的吸收峰主要来自于声子的贡献, 而目前的计算程序对声子和电声耦合的处理仍存在困难, 从而造成结果的差异, 但整体上计算得到的数据和实验结果是基本一致的。比较两个方向上的光导谱可以发现在超过 5.35 eV 以后光电导都迅速增加, 表明带间吸收急剧变强, 大量由占据态到空的 Ru d 和 O p 态的光吸收出现。

zx) 和 O $p\pi$ 轨道形成的具有反键态性质的能带穿过费米面, 四个电子占据这些反键态。在沿 x 方向上, $d_{yz} - p\pi$ 和 $d_{zx} - p\pi$ 为未占据的, 因此 $d_{xy} - p\pi$ 带主要以空穴的形式存在, 使得电导谱在这一方向呈现类金属性; 而沿 z 方向, 由于能带位于费米面以下, 且色散度较低, 电导谱在低能区域不存在类金属性。能带结构计算的结果也表明沿 a 和 b 方向的 $\Gamma - \Delta - U - Z$ 线上, 由 Ru 的 d_{yz} , zx 和 O 的 $p\pi$ 轨道形成的反键特性的能带穿过费米面, 具有较强的非局域性, 而沿 c 方向的 $Z - \Delta - \Gamma$ 线上的能带结构色散较弱, 没有穿过费米面的能带。由此可以认为费米面附近能带结构在不同方向上色散的差异是光导谱存在各向异性主要原因。沿 x 方向和沿 z 方向的等离子体频率 ω_p 分别为 4.31 eV 和 0.21 eV, 使得光导谱在两个方向上等离子体吸收出现巨大差异。

图 3 示为沿 x 和 z 方向的电子能量损失谱 (EELS)。EELS 代表了荷电粒子以一定速度通过固体时的能量损失。理论上电子能量损失函数定义为负的复介电函数倒数虚部, 即

$$f_{\text{EELS}}(\omega) = -\text{Im} \frac{1}{\epsilon(\omega)} = \frac{\epsilon''(\omega)}{[\epsilon'(\omega)]^2 + [\epsilon''(\omega)]^2}, \quad (7)$$

对比 Sr_2RuO_4 的电子能量损失谱和反射谱的

结果可以发现,在反射率小的地方,由于带间吸收作用比较强烈,电子能量的损失相对较大。如沿 x 方向的损失谱在 1.90 eV 附近的损失峰大致对应于反射谱在 2.17 eV 附近形成带内跃迁和带间跃迁转换,出现反射率的极小值。而且在能量损失谱中同样也出现了两个微弱的谱峰,这也和反射谱的情况相似,所以由电子能量损失谱可以得到和反射谱一致的结论。

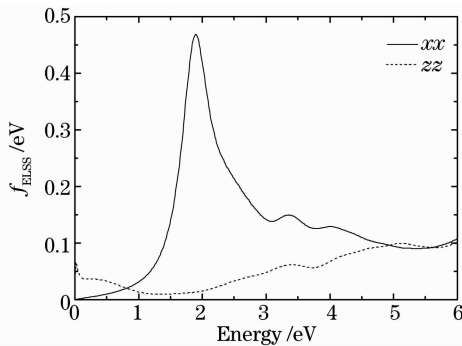


图3 Sr_2RuO_4 沿 x 方向与沿 z 方向的电子能量损失谱

Fig. 3 Electron energy loss spectra of Sr_2RuO_4

below 6 eV along x and z direction

Sr_2RuO_4 作为极性晶体,包含的红外活性的晶格振动模式,对 Sr_2RuO_4 晶体的光学性质有一定的贡献,但目前的密度泛函理论计算尚无法将其很好地纳入到光导谱的结果之中。在稍高的光子能量区域这些模式的波数和强度都非常有限,其贡献往往淹没在等离子体吸收中而无法辨认,但对 $\hbar\omega \sim 0$ eV 附近的光导谱可能存在特殊的影响,本文没有强调这一区域,所以暂时忽略其作用和影响。计算结果与实验观测数据以及其它理论数据都得到了较好的符合,从而也在理论进一步上验证了实验的结果。

4 结 论

基于密度泛函理论的第一性原理方法研究了超导体 Sr_2RuO_4 各向异性的光学性质。计算中,对光电导张量的带内跃迁部分采用 Drude 项表示,Drude 展宽取固定值 $\hbar/\tau_D = 0.35$ eV,这个选取和对这个问题的一般处理是一致的^[27,28]。而对带间跃迁部分,为了描述温度效应对谱线的影响,采用 Lorentz 展宽的方法,分别取 $\delta = 0.00, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25$ 进行计算,结果表明 δ 的引入使得计算得到的谱线更为平滑,但随 δ 变大结果逐渐趋于稳定,因此仅给出 $\delta = 0.20$ 时的数据,更接近于实验测量的环境。虽然计算可以达到很高的能量,但更高的入射光子能量没有实际意义,因此为了和实验比

较也只列出了 0~6.00 eV 的部分。

总体而言,采用密度泛函的第一性原理计算研究 Sr_2RuO_4 的光导谱、反射谱以及电子能量损失谱等光学性质,结果与实验吻合的很好,并且给出了更加丰富的细节,对进一步的理论研究和实验分析提供了很好的参考作用。计算得到的反射谱、光导谱和电子能量损失谱的结果表明 Sr_2RuO_4 沿 x 方向和沿 z 方向的光学性质存在较大差异。沿 x 方向光导谱存在类金属性,而沿 z 方向则不存在等离子体共振吸收峰。通过与 Sr_2RuO_4 的能带结构及其晶体中各原子的分解态密度图比较可以认为费米面附近能带结构在不同方向上色散的差异是光导谱存在各向异性主要原因。

参 考 文 献

- 1 Masatoshi Imada, Atsushi Fujimori, Yoshinori Tokura. Metal-insulator transitions [J]. *Reviews of Modern Physics*, 1998, **70**(4): 1039~1263
- 2 Z. Fang, K. Terakura. Structural distortion and magnetism in transition metal oxides; crucial roles of orbital degrees of freedom [J]. *J. Phys. : Condensed Matter*, 2002, **14**(11): 3001~3014
- 3 Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida *et al.*. Superconductivity in a layered perovskite without copper [J]. *Nature*, 1994, **372**(6506): 532~534
- 4 T. Ito, H. Takagi, S. Ishibashi *et al.*. Normal-state conductivity between CuO_2 planes in copper oxide superconductors [J]. *Nature*, 1991, **350**(6319): 596~598
- 5 Y. Nakamura, S. Uchida. Anisotropic transport properties of single-crystal $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$: Evidence for the dimensional crossover [J]. *Phys. Rev. B*, 1993, **47**(13): 8369~8372
- 6 K. Takenaka, K. Mizuhashi, H. Takagi *et al.*. Interplane charge transport in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$: Spin-gap effect on in-plane and out-of-plane resistivity [J]. *Phys. Rev. B*, 1994, **50**: 6534~6537
- 7 F. Lichtenberg, A. Catana, J. Mannhart *et al.*. Sr_2RuO_4 : A metallic substrate for the epitaxial growth of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1992, **60**: 1138~1140
- 8 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
- 9 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
- 10 Chen Qian, Xie Quan, Yang Chuanghua *et al.*. First-principles calculation of electronic structure and optical properties of Mg_2Si with doping [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(1): 229~235
- 11 陈茜, 谢泉, 杨创华等. 掺杂 Mg_2Si 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
- 12 Zhou Shiyun, Xie Quan, Yan Wanjun *et al.*. First-principles calculation of electronic structure and optical properties of CrSi_2 with doping Mn [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(10): 2848~2853
- 13 周士芸, 谢泉, 闫万珺等. 锰掺杂二硅化铬电子结构和光学性质的第一性原理计算 [J]. *光学学报*, 2009, **29**(10): 2848~2853
- 14 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
- 15 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
- 12 Cheng Zhengze. First principles study on electronic structure and optical properties of aragonite(CaCO_3) [J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(11): 2187~2190
- 程正则. 第一性原理研究霏石的结构和光学性质[J]. 光学学报, 2008, **28**(11): 2187~2190
- 13 S. L. Cooper, A. L. Kotz, M. A. Karlow *et al.*. Development of the optical conductivity with doping in single-domain $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ [J]. *Phys. Rev. B*, 1992, **45**(5): 2549~2552
- 14 C. C. Homes, T. Timusk, R. Liang *et al.*. Optical conductivity of *c* axis oriented $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.70}$: Evidence for a pseudogap [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **71**(10): 1645~1648
- 15 J. Schützmann, S. Tajima, S. Miyamoto *et al.*. *c*-axis optical response of fully oxygenated $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$: observation of dirty-limit-like superconductivity and residual unpaired carriers [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, **73**(1): 174~177
- 16 K. Tamasaku, Y. Nakamura, S. Uchida. Charge dynamics across the CuO_2 planes in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, **69**(9): 1455~1458
- 17 K. Tamasaku, T. Ito, H. Takagi. Interplane charge dynamics in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, **72**(19): 3088~3091
- 18 T. Katsufuji, M. Kasai, Y. Tokura. In-plane and out-of-plane optical spectra of Sr_2RuO_4 [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **76**(1): 126~129
- 19 Tamio Oguchi. Electronic band structure of the superconductor Sr_2RuO_4 [J]. *Phys. Rev. B*, 1995, **51**(2): 1385~1388
- 20 <http://www.wien2k.at>
- 21 J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77**(18): 3865~3868
- 22 J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, **78**(7): 1396~1396
- 23 L. Walz, F. Lichtenberg. Refinement of the structure of Sr_2RuO_4 with 100 and 295 K X-ray data [J]. *Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications*, 1993, **49**(7): 1268~1270
- 24 J. L. Martinez, C. Prieto, J. Rodríguez-Carvajal *et al.*. Structural characterization and magnetic properties of $\text{Sr}_{2-x}\text{Ca}_x\text{RuO}_4$ Oxides [J]. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 1995, **140-144**: 179~180
- 25 C. S. Wang, J. Callaway. Band structure of nickel: Spin-orbit coupling, the Fermi surface, and the optical conductivity [J]. *Phys. Rev. B*, 1974, **9**(11): 4897~4907
- 26 R. Kubo. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems [J]. *J. Phys. Soc. Japan*, 1957, **12**: 570~586
- 27 Tan Mingqiu, Tao Xiangming, Xu Xiaojun *et al.*. A study on the electronic structure, superconductivity, and optical properties of MgCNi_3 [J]. *Acta Physica Sinica*, 2003, **52**(2): 463~467
- 谭明秋, 陶向明, 徐小军等. MgCNi_3 的电子结构、光学性质与超导电性 [J]. 物理学报, 2003, **52**(2): 463~467
- 28 Cai Jianqiu, Tao Xiangming, Chen Wenbin *et al.*. Density-functional theory calculations on the magneto-optical Kerr effects in Co_2TiSn and Co_2ZrSn [J]. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2005, **292**: 476~482