

文章编号: 0253-2239(2010)05-1406-07

空位缺陷对 CdS 电子结构和光学性质的影响

李春霞¹ 党随虎¹ 韩培德²

(¹ 长江师范学院物理学与电子工程学院, 重庆 408003; ² 太原理工大学材料科学与工程学院, 山西 太原 030024)

摘要 采用基于密度泛函理论(DFT)第一性原理的平面波超软赝势方法,对空位缺陷体系的几何结构进行优化计算,发现空位引起周围原子的弛豫,晶格结构发生畸变。在此基础上研究了空位缺陷对闪锌矿结构 CdS 体系电子结构(能带结构、电子态密度)的影响,结果表明,S 空位使得能带变窄,而 Cd 空位使带隙变宽,但二者仍为直接带隙半导体。对光学性质的研究发现,由于空位的介入使其邻近原子电子结构发生变化,使得空位缺陷体系光学性质的变化主要集中在低能量区。

关键词 光学材料;S 和 Cd 空位;闪锌矿结构;CdS 晶体;电子结构;第一性原理

中图分类号 O641;O649 **文献标识码** A **doi:** 10.3788/AOS20103005.1406

Vacancies Effects on Electronic Structure and Optical Properties of CdS

Li Chunxia¹ Dang Suihu¹ Han Peide²

¹ College of Physics and Electronic Engineering, Yangtze Normal University, Chongqing 408003, China

² College of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan, Shanxi 030024, China

Abstract Geometrical structure of CdS with vacancy was optimized by using density functional theory (DFT) based on first-principle ultrasoft pseudopotential method. Optimized results showed that the vacancy resulted in local lattice distortion and the relaxation of neighboring atoms. Then vacancy effects on electronic structure (energy-band structure and electron-state density) of CdS were analyzed. The results revealed that S vacancy made the band gap narrower and Cd vacancy made it wider, but CdS with S and Cd vacancy were direct band gap semiconductor. The optical properties of CdS with vacancies were investigated. The results indicated that changes on optical properties mainly focused on low-energy region because of the change of electronic structure of atom neighbor vacancy.

Key words optical materials; S and Cd vacancy; Zinc blend structure; CdS crystal; electronic structure; first principle

1 引 言

CdS 为 II-VI 族宽带隙半导体材料,是具有很大潜力的光电子材料,在传感器、太阳能电池、光探测器和激光材料等领域有着广泛的应用^[1,2]。实际中,半导体材料在生长过程中会产生缺陷,这种缺陷是电激活的,由于缺陷和载流子间的相互作用,使得缺陷的存在严重影响半导体的电学和光学性质。目前人们对 CdS 掺杂后缺陷体系基本性能的研究已有大量的实验和理论工作^[3~10]。空位作为半导体最重要的缺陷之一,已成为半导体性质与器件研究热点之一。对 HfO₂^[11] 和 CaO^[12] 第一性原理计算结果表明,空位能使它们产生室温铁磁性并改变其电子性质。Kazume 等^[13] 用第一性原理的方法对

CdS 空位缺陷及 Cu 掺杂体系的导电性能进行了深入研究,发现作为施主型的 S 空位对 Cu 掺杂 CdS 形成 p 型电导起补偿作用。但目前有关空位缺陷 CdS 对电子结构和光学性质的影响还鲜见报道。因此,深入研究 CdS 半导体材料空位缺陷体系的晶体结构、电子结构及光学性质是了解其压电、光电等不可缺少的理论基础,并对 CdS 材料在高灵敏度光传感器、太阳能电池及发光二极管等的实验研究及潜在应用同样具有重要意义。

本文采用基于第一性原理的平面赝势波方法,对闪锌矿结构 CdS 的 35 原子超晶胞及其单个 S 及 Cd 空位体系进行几何结构优化,从理论上给出存在空位缺陷前后的晶格常数,对 S, Cd 空位缺陷体系的能带

收稿日期: 2009-05-31; 收到修改稿日期: 2009-07-13

基金项目: 重庆市教委科学技术研究(KJ081307, KJ091312)和长江师范学院重点学科基金(2003148)资助课题。

作者简介: 李春霞(1979—),女,硕士,讲师,主要从事纳米材料计算机模拟方面的研究。

E-mail: lichunxia1979@126.com

结构、态密度以及光学性质进行了计算,对比 CdS 体相分析了空位缺陷对其电子结构和光学性质的影响。

2 模型结构和计算方法

2.1 模型结构

闪锌矿结构的 CdS 属于 $F43_m$ 空间群,晶格常数为 $a=b=c=0.58304 \text{ nm}^{[14]}$,原子坐标是 Cd(0, 0, 0)和 S(0.25, 0.25, 0.25),为了尽可能准确地模拟 CdS 材料空位缺陷行为,减小缺陷间的耦合作用,选用在 CdS 单晶胞的基础上构造 $2 \times 2 \times 2$ 的超晶胞,如图 1 所示。图中 CdS 中 Cd—S 键长都为 0.2525 nm, Cd—S 键之间的键角为 $109^\circ 47'$ 。计算缺陷时在 (0.125, 0.125, 0.125) 晶格位置上取 S 空位, (0.5, 0.5, 0.5) 位置上取 Cd 空位。在 $2 \times 2 \times 2$ 的超晶胞中, S, Cd 空位的浓度均为 1/16, 百分率浓度均为 6.25%。

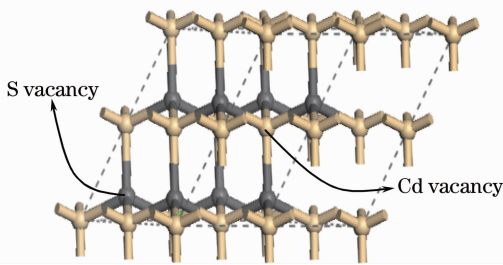


图 1 CdS 超晶胞

Fig. 1 Supercell of CdS

2.2 计算方法

本文的计算采用的是 CASTEP^[15] 软件是一个基于密度泛函方法(DFT)^[16] 的从头算量子力学程序,利用总能量平面波赝势方法,将粒子势用赝势替代,电子波函数用平面波基组展开,电子-电子相互作用的交换和相关势由广义梯度近似(GGA-PBE)^[17] 进行校正,它是目前较为准确的电子结构计算的理论方法。在晶体周期性势场中,采用三维周期性边界条件,将多电子体系用平面波函数展开表示。为尽量减少平面波基个数,采用超软赝势^[18] 来描述离子实与价电子之间的相互作用,选取 Cd, S 的价电子组态分别为 Cd: $4d^{10} 5s^2$, S: $3s^2 3p^4$ 。在倒易的 k 空间中,平面波截断能(E_{cut})选取为 350 eV。系统总能量和电荷密度在布里渊(Brillouin)区的积分计算使用 Monkhorst-Pack^[19] 方案来选择 K 网格点为 $4 \times 4 \times 2$,以保证体系能量和构型在准完备平面波基水平上的收敛。在自洽场运算中,采用了 Pulay 密度混合法,自洽场设为 2×10^{-6} eV。在对模型的结构优化中,采用了 BFGS 算法,优化参数有 4 个,即原子间相

互作用力的收敛标准设为 0.5 eV/nm;单原子能量的收敛标准设为 2×10^{-5} eV;晶体内应力的收敛标准设为 0.1 GPa;原子最大位移收敛标准设为 2×10^{-4} nm,结构优化完成的标准是四个参数达到或优于收敛标准。在优化后结构的基础上计算 CdS 材料中 S, Cd 空位缺陷体系的电子结构和光学性质。

3 计算结果与讨论

3.1 晶体结构

首先对 CdS 超晶胞及含 S, Cd 空位缺陷体系进行几何优化。计算结果如表 1 所示, CdS 的晶格常数与实验值^[14] 相差 5.9×10^{-3} nm, 在允许的误差范围内。一般情况下广义梯度近似(GGA)在计算晶格常数时结果会稍偏大,不如局域密度近似(LDA)的精确,但 GGA 作为对 LDA 近似的一种改进,在总能量、电离能、电子亲和能等方面要优于 LDA 近似。从表 1 可以看出,取 S, Cd 空位使得晶胞晶格常数减小,而取 S 空位后的变化尤为明显。与 CdS 中 Cd—S 平均键长相比,取空位后体系的 Cd—S 平均键长都发生了变化,在含 S 空位体系中增大了 10^{-5} nm, 而含 Cd 空位缺陷体系中减小了 1.52×10^{-3} nm。空位缺陷使得 CdS 结构局部发生畸变。在相同的计算条件下,分别计算了 3 种情况下的平均结合能,如表 1 中所示。对于不同的空位缺陷,平均结合能都有所增加,说明含有空位晶体稳定性稍有降低。含 S 空位体系结合能较含 Cd 空位低,说明 S^{2-} 形成的 S 空位缺陷(V_s) 缺陷在 CdS 中较 Cd^{2+} 形成的 Cd 空位缺陷(V_{cd}) 缺陷更加稳定。但是晶体结构仍然是闪锌矿结构,因此 Cd 或 S 空位基本上不引起 CdS 晶体结构的变化。

表 1 CdS 及其 S, Cd 空位的晶格常量

Table 1 The lattice constant of CdS and

CdS: (S, Cd) vacancy

	Lattice constant		
	CdS	CdS: S vacancy	CdS: Cd vacancy
Calculated value /mm	0.41810	0.41061	0.41238
Experiment value /mm ^[14]	0.41220	-----	-----
Cd—S average bond length /mm	0.25553	0.25554	0.25401
Binding energy /eV	-0.23128	-0.21458	-0.21056

在成键时, S 原子和 Cd 原子分别贡献 4 个成键电子形成极性共价键, 当形成 S 或 Cd 空位时同时

移走相应的 4 个成键电子,这样空位的每一个近邻的 Cd 或 S 原子将出现 4 个有效电荷的悬挂键,这些悬挂键会与近邻以及次近邻通过电子共振耦合进行重整。这是导致以上结构变化的主要原因。空位的存在必然伴随电子的重新分布,图 2 给出了计算得到的 CdS 及其空位缺陷体系的(110)面的电荷密

度图。将图 2(b),2(c)与 2(a)对比可看出,由于悬挂键的重整使得空位近邻原子的成键电荷分布出现差别,明显的电子密度分布到空位及其周围,它们提供了吸引空位周围的原子移向空位的静电力,导致空位近邻原子的弛豫行为,并最终导致晶体结构发生结构畸变。

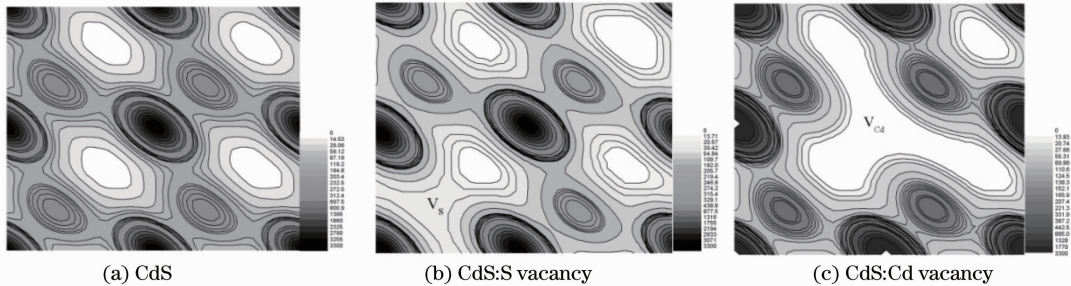


图 2 典型晶面(110)的电荷密度分布

Fig. 2 Charge density contour of typical (110) crystal plane

3.2 电子结构

3.2.1 CdS 的电子结构

首先计算 CdS 体相电子结构以便于与 S,Cd 空位缺陷体系进行比较,图 3 为 CdS 的能带结构及总体态密度图,其中 E_f 为费米能级。从图 3 可以看

出,CdS 的价带由 $-11.5 \sim -6$ eV 的下价带和 -4.5 eV ~ 0 的上价带组成,价带顶出现 3 个子带,分别是简并的重空穴、轻空穴和自旋-轨道耦合所分裂出的劈裂带。图 4 为 CdS 的分波态密度(PDOS)图,将图 3 与图 4 中的分波态密度图对比可以看出,

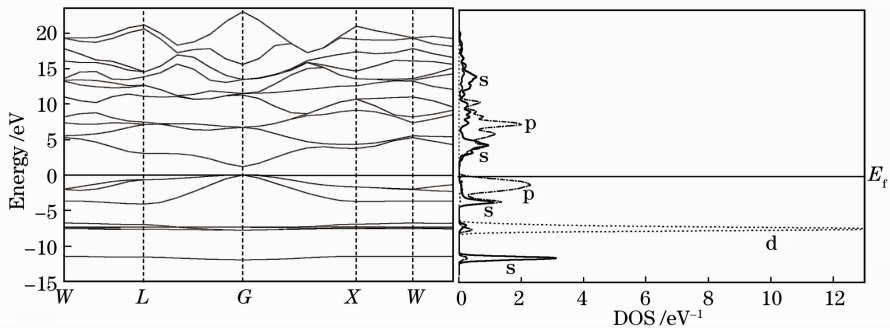


图 3 CdS 的能带结构和态密度

Fig. 3 Energy band structure and density of states of CdS

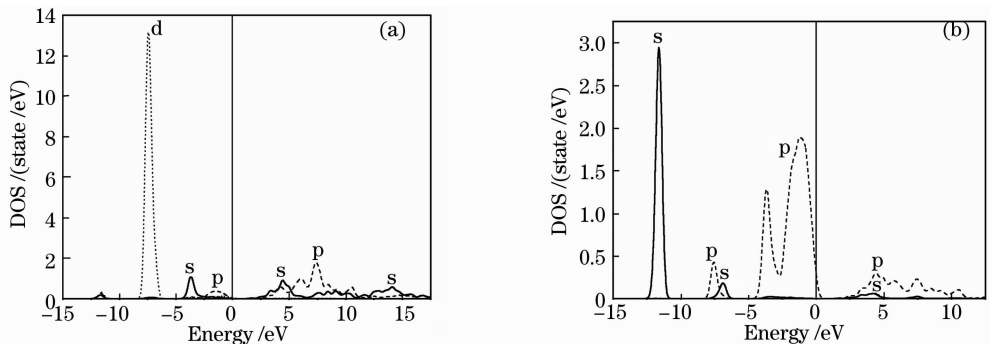


图 4 CdS 中 Cd(a)和 CdS 中 S(b)的分波态密度

Fig. 4 Partial density of states for Cd(a),S(b) of CdS

上价带主要来源于 S 3p 和 Cd 5s; 下价带主要来源于 Cd 4d 组成和少量的 S 3p。CdS 的导带主要来源于 S 3s3p 和 Cd 5s。计算得到 CdS 的带隙值 $E_g = 1.18$ eV, 比 E. Deligoz^[20] 计算的 1.07 eV 更接近实验值 2.42 eV, 但仍偏低, 原因在于理论本身高估了价电子 Cd 5s 和 S 3s3p 之间的排斥作用, 使得价带的带宽增大能隙降低。此类计算中 GGA 近似和 LDA 近似都存在 E_g 计算值偏低的普遍问题^[21,22], 但其相对值的比较还是非常准确的, 因此并不影响对 CdS 电子结构的理论分析。由图 3 可以看出 CdS 是一种直接带隙半导体, 价带顶和导带底都位于布里渊区的 G 点处。

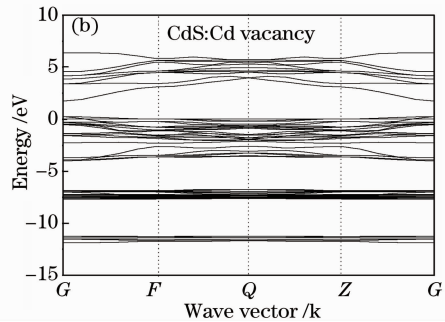
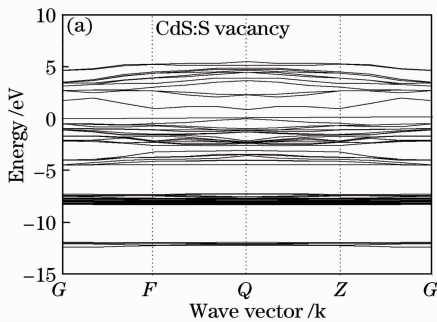


图 5 CdS:S 空位(a)和 CdS:Cd 空位(b)的能带结构

Fig. 5 Energy band structure of CdS:S vacancy(a) and CdS:Cd vacancy(b)

图 6 是计算得到的 S 空位缺陷体系的态密度。把缺陷体系总态密度[图 6(a)]与 CdS 体相态密度(图 3)对比, 发现在 0~6 eV 处有连续的态密度峰值, 而 -5 eV~0 处的电子向低能方向移动。为了更详细的分析电子结构, 对体系中缺陷附近各原子的分态密度进行研究, 如图 6(b), 6(c)和 6(d)所示。从图中可以看出, 0~6 eV 处主要是 Cd 5s 和少量次近邻 S 3s 的贡献, 表明近邻 Cd 原子的 s 轨道和次近邻 S 原子的 s 轨道有着强烈的耦合相互作用。-5 eV~0 处的电子是由于 S 3p 电子向价带低能方向移动造成的。比较 S 空位近邻和次近邻 S 原子的分态密度, 受空位的影响, 近邻 S 原子的 3s 电子在上价带 -5 eV~0 处出现非占据态, 而其 3p 电子保持不变。因此, S 空位缺陷体系电子态密度的变化主要是由于空位的介入使其邻近及次邻近原子电子结构发生部分变化所致。

图 7 是计算得到的 Cd 空位缺陷体系的总态密度[图 7(a)]和缺陷邻近原子的分态密度[如图 7(b), 7(c)和 7(d)所示]。与 S 空位缺陷体系的情况有较大不同, 费米能级移入价带顶, 同时在费米能级以上产生少量的空穴能级, 属 p 型电导。费米能级处的电子占据增多, 但在 0~2.5 eV 处出现微

3.2.2 S, Cd 空位缺陷体系的电子结构

计算结果表明, S, Cd 空位缺陷使 CdS 材料的电子结构发生明显变化, 图 5 为 S 及 Cd 空位缺陷体系的能带结构图。由图 5 可以看出, S, Cd 两种空位缺陷体系情况下电子态都发生了简并, 仍为直接带隙半导体, 导带底和价带顶分别位于 Brillouin 区的 Q 点和 G 点处。但 S 空位缺陷使得 CdS 带隙变窄为 0.8 eV, 其原因在于价带顶的轻微上升和导带底的轻微下降; 而 Cd 空位却使得带隙变宽为 1.8 eV, 这主要是因为导带底的较大上升, 同时费米能级穿越价带, 体系显示微弱半金属性质。

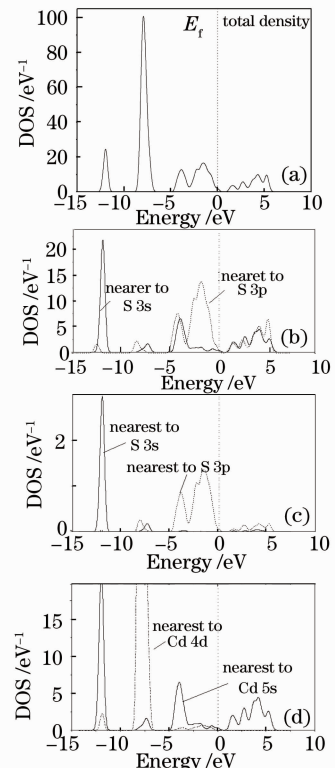


图 6 CdS:S 空位的态密度

Fig. 6 Density of states for CdS:S vacancy

弱的电子态分布。分析分态密度可知,费米能级附近主要由 S 3p 电子占据,导带部分 2.5~7.5 eV,主要来自 S 3p 和第一近邻 Cd 5s 轨道电子的贡献,预示着 S 的 3p 轨道和 Cd 5s 电子的耦合作用,而与其次近邻的 Cd 5s 耦合作用极小。价带 -2.5~5 eV 间主要由 S 3p 轨道贡献电子,有少量 Cd 空位近邻的 Cd 5s 轨道电子,这些都是因空位而使其周围邻近原子电子结构发生变化。

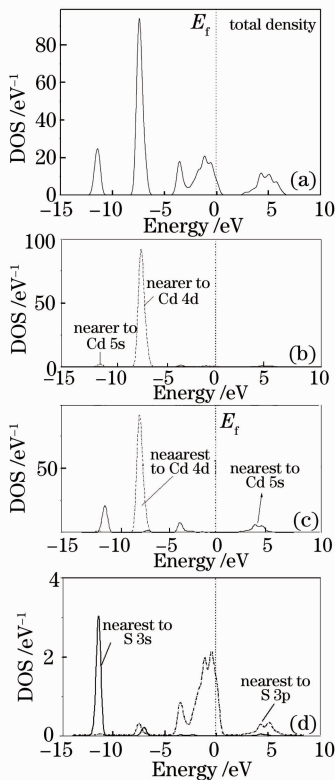


图 7 CdS: Cd 空位的态密度

Fig. 7 Density of states for CdS: Cd vacancy

3.3 光学性质

在线性响应范围内,固体宏观光学响应函数通常可以由光的复介电常量 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 来描述,而晶体中声子和电子间的相互作用可以用电子基态波函数中包含的含时微扰项来表示,声子电场扰动引起了电子波函数在占据态与非占据态间的转变,所以激子对光谱产生的结果与价带和导带的状态密度之间的关系便可以通过选择合适的加权性矩阵元素来实现。即可以利用计算占据态和非占据态波函数的矩阵元素得到介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2}{m^2\omega^2} \sum_{v,c} \int_{BZ} d^3\mathbf{K} \frac{2}{(2\pi)^3} |e \cdot M_{cv}(\mathbf{K})|^2 \times \delta[E_c(\mathbf{K}) - E_v(\mathbf{K}) - \hbar\omega],$$

式中 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, $|e \cdot M_{cv}(\mathbf{K})|^2$ 为动量跃迁矩阵元,

ω 为角频率, $E_c(\mathbf{K}), E_v(\mathbf{K})$ 分别为导带和价带上的本征能级。而介电函数实部 $\epsilon_1(\omega)$ 则可以利用 Kramers-Kronig 色散关系求出。所有其它的光学性质可以由 $\epsilon_1(\omega)$ 和 $\epsilon_2(\omega)$ 推导出,如反射率 $R(\omega)$, 吸收系数 $I(\omega)$ 。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,更易于与物理过程的微观模型及固体的微观电子结构联系起来^[23],下面从电子结构来分析光学性质。

图 8 是计算所得 CdS 及其 S, Cd 空位缺陷体系的光学性质。在 CdS 光学性质的计算中得到的结果与 Bieniewsk 等^[24] 的实验结果相符合。但目前尚无 S, Cd 空位缺陷体系光学性质的实验报道,所以文中通过把 S, Cd 空位缺陷与 CdS 光学性质比较对其性质进行预测。图 8(a) 是介电函数的虚部, CdS 及其 S, Cd 空位缺陷体系均出现 3 个主介电峰, CdS 的峰值分别为 1.2, 5.7 和 11.7 eV, 与 Zhou Huang 等^[25] 的计算结果相吻合。1.2 eV 处的介电峰对应于直接跃迁,来自于价带 S 3p 与未占居导带间的电子跃迁; 5.7 eV 处的峰与价带 S 3p 与导带 Cd 5s 之间的跃迁有关; 而 11.7 eV 处的峰可能来自于下价带的 Cd 4d 与导带 S 3p 轨道间的电子跃迁。对比发现, S, Cd 空位缺陷体系的介电函数虚部在高端 ($E \geq 7.0$ eV) 与 CdS 几乎完全一致, 但低能端有所不同。S 空位缺陷体系在 1.8 eV 处出现高而尖的介电峰, 是 S 空位影响其近邻 Cd 原子的电子分布, 使得低能端介电峰位和强度发生变化, 该处的介电峰可能来自于价带 S 3p 与导带 Cd 5s 间的电子跃迁。而 Cd 空位缺陷体系在 0.6 eV 有介电峰是 Cd 空位对其近邻 S 原子电子分布的影响, 使得近邻 S 3p 态向高能方向移动, 并导致 Cd 空位缺陷体系低能端介电峰位和强度的变化。图 8(b) 是介电函数的实部, 变化情况与虚部相似, 主要集中在低能量区。CdS 及其 S, Cd 空位缺陷的吸收光谱如图 8(c) 所示, 由图可看出 CdS 及其 S, Cd 空位缺陷的吸收谱本征吸收位于紫外光谱区。CdS 吸收边为 1.18 eV, 位置与带隙宽度对应, 即价带顶电子跃迁到导带底的能量, 同样也表征 CdS 为直接带隙半导体。但取 S, Cd 空位缺陷后, 光吸收边有明显变化。在 S 空位缺陷体系存在微小红移, 而 Cd 空位缺陷体系有蓝移现象, 这是 Cd, S 空位缺陷引起近邻原子电子结构变化所致。与 CdS 对比缺陷体系的吸收峰系数及位置都有所变化, 在 1.35 eV 低能处, S 空位缺陷体系的吸收峰位置向高端移动, 原因是取 S 空位后, 其近邻的 Cd 5s 轨道电子向高端发

生移动;而 Cd 空位缺陷体系在此处向低能端移动是由于 Cd 空位近邻的 S 3p 轨道电子向低能端的移

动引起。图 8(d)是反射谱,共出现了 3 个反射峰,变化趋势与吸收谱一致。

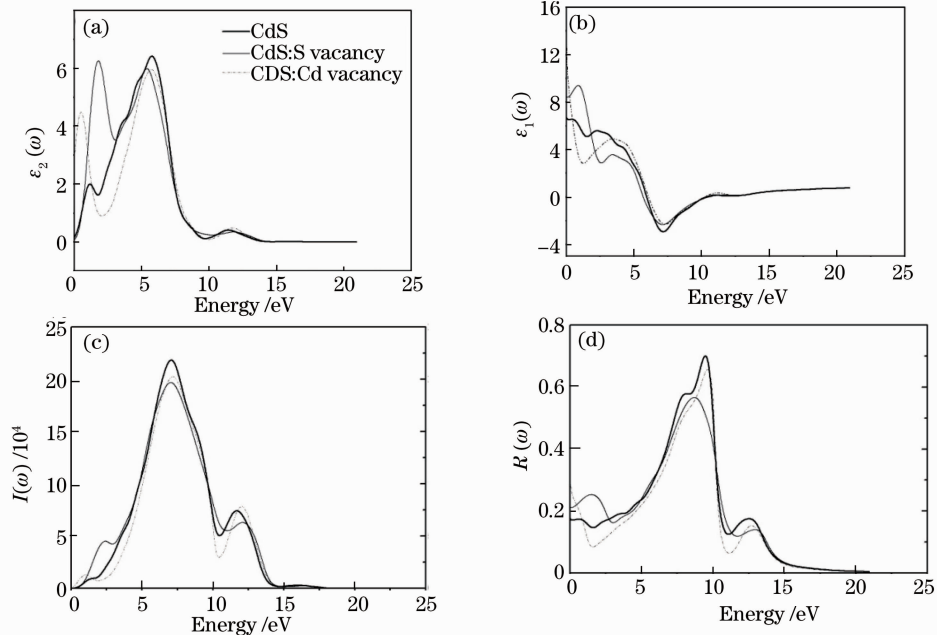


图 8 CdS 及其 S 和 Cd 空位缺陷体系介电函数虚部(a),实部(b),吸收谱(c),反射谱(d)

Fig. 8 (a) imaginary parts, real parts (b) of dielectric function, absorption spectrum(c), reflection spectrum(d) of CdS, CdS:S vacancy, CdS:Cd vacancy

4 结 论

采用基于密度泛函理论的第一性原理方法,计算了 CdS 及其 S,Cd 空位缺陷体系的电子结构和光学性质。结果表明,S,Cd 空位缺陷会引起周围原子的弛豫,使得晶格常数减小;S,Cd 空位缺陷引起体系能隙变化,S 空位缺陷使得能带变窄;而 Cd 空位却使带隙变宽,并计算得到 CdS 及其空位缺陷体系材料均为直接带隙半导体;S,Cd 空位缺陷体系的光学性质在高能量区与 CdS 的基本一致,低能量区有着明显的变化,分析认为光学性质的变化主要是由于空位邻近原子电子的跃迁引起的。

参 考 文 献

- Shen Jie, Ma Guohong, Zhang Zhuangjian *et al.*. Research on two-photon absorption enhancement of CdS in one-dimensional photonic band gap structures [J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25** (8): 1121~1125
- 沈杰, 马国宏, 章壮健等. 用一维光子带隙结构增强硫化镉双光子吸收研究[J]. *光学学报*, 2005, **25**(8): 1121~1125
- P. P. Sahay, R. K. Nath, S. Tewari. Optical properties of thermally evaporated CdS thin films[J]. *Cryst. Res. Technol.*, 2007, **42**(3): 275~280
- Dang Suihu, Li Chunxia, Han Peide. First-principles calculation of CdS electronic structure doped with Mg and Cu[J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, **58**(6): 4137~4143
- 党随虎, 李春霞, 韩培德. Mg, Cu 掺杂 CdS 电子结构的第一性原理研究[J]. *物理学报*, 2009, **58**(6): 4137~4143

- M. Rohlfing, P. Krüger, J. Pollmann. Quasiparticle band structure of CdS[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1995, **75**: 3489~3492
- D. Vogel, P. Krüger, J. Pollmann. Structural and electronic properties of group-III nitrides [J]. *Phys. Rev. B*, 1997, **55**: 12836~12839
- L. C. LewYan Voon, M. Willatzen, M. Cardona *et al.*. Terms linear in k in the band structure of wurtzite-type semiconductors [J]. *Phys. Rev. B*, 1996, **53**: 10703~10714
- U. V. Desnica, I. D. Desnica-Frankovic', R. Magerle *et al.*. Compensating defects and electrical activation of donors in CdS [J]. *Physica B: Condensed Matter*, 1999, **273**: 907~910
- 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
- Xu Ronghui, Wang Yongxian, Jia Guangqiang *et al.*. Synthesis of zinc blende CdS nanocrystallites using 3-M mercaptopropionic acid as precursor by hydrothermal method [J]. *Chemical J. Chinese Universities*, 2007, **28**(2): 217~219
- 许荣辉, 汪勇先, 贾广强等. 闪锌矿结构 CdS 纳米晶体的制备[J]. *高等学校化学学报*, 2007, **28**(2): 217~219
- Ding Liyun, Jiang Desheng, Huang Jun. Photorefractive effect of polymer sensitized by CdS nanoparticles [J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(10): 1526~1531
- 丁莉芸, 姜德生, 黄俊. 掺杂 CdS 纳米粒子聚合物的光折变效应研究[J]. *光学学报*, 2006, **26**(10): 1526~1531
- I. S. Elfimov, S. Yunoki, G. A. Sawatzky. Possible path to a new class of ferromagnetic and half-metallic ferromagnetic materials[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, **89**: 216403
- C. D. Pemmaraju, S. Sanvito. Ferromagnetism driven by intrinsic point defects in HfO₂ [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005,

- 94; 217205
- 13 Kazume Nishidate, Takuya Sato, Yuta Matsukura *et al.*. Density-functional electronic structure calculations for native defects and Cu impurities in CdS [J]. *Phys. Rev. B*, 2006, **74**: 035210
- 14 D. Rodic, V. Spasojevic, A. Bajorek *et al.*. Similarity of structure properties of $\text{Hg}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}$ and $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}$ (structure properties of HgMnS and CdMnS) [J]. *J. Magnetism and Magnetic Materials*, 1996, **152**: 159~164
- 15 M. D. Segall, P. Lindan, M. J. Probert *et al.*. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code [J]. *J. Phys. Condense Matter*, 2002, **14**: 2717~2744
- 16 Conyers Herring, A new method for calculating wave functions in crystals [J]. *Phys. Rev.*, 1940, **57**: 1169~1177
- 17 J. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77**: 3865
- 18 D. Vanderbilt. Soft self-consistent pseudopotentials in generalized eigenvalue formalism [J]. *Phys. Rev. B*, 1990, **41**: 7892~7895
- 19 J. Hendrik, Monkhorst, James D. Pack. Special points for Brillouin-zone integrations [J]. *Phys. Rev. B*, 1976, **13**(12): 5188~5192
- 20 E. Deligoz, K. Colakoglu, Y. Ciftci. Elastic, electronic and lattice dynamical properties of CdS, CdSe and CdTe[J]. *Physica B; Condensed Matter*, 2005, **373**: 124~130
- 21 Ding Shaofeng, Fan Guanghan, Li Shuti *et al.*. First-principles study of the p-type doped InN[J]. *Acta Physica Sinica*, 2007, **56**(7): 4062~4067
丁少峰, 范广涵, 李述体等. 氮化镓 p 型掺杂的第一性原理研究 [J]. *物理学报*, 2007, **56**(7): 4062~4067
- 22 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): 1227~1232
张 军, 韩胜元, 卢贵武等. 铌酸锂晶体结构和光学性质计算 [J]. *中国激光*, 2007, **34**(9): 1227~1232
- 23 Xiang Dong, Liu Bo, Gu Mu *et al.*. Theoretical calculation of electronic structures and optical properties of YTaO_4 and LuTaO_4 [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(2): 448~453
向 东, 刘 波, 顾 牡等. YTaO_4 和 LuTaO_4 电子结构和光学性质的理论计算 [J]. *光学学报*, 2009, **29**(2): 448~453
- 24 T. M. Bieniewski, S. J. Czyzak. Refractive indexes of single hexagonal ZnS and CdS crystals [J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1963, **53**(4): 496~497
- 25 M. Z. Huang, W. Y. Ching. Calculation of optical excitations in cubic semiconductors. I. electronic structure and linear response [J]. *Phys. Rev. B*, 1993, **47**(15): 9449~9463

《中国激光》“激光分子影像诊断与治疗监控”专题 征 稿 启 事

随着光学成像技术、分子标记技术和基因组学/蛋白质组学的发展,激光分子影像已经成为光子学技术与生命科学和医学应用交叉的关键技术科学,发展十分迅猛。激光分子影像可在细胞和分子层面探索生命最小基本单元的功能、疾病发生发展的分子机理,可为疾病的早期诊断及其治疗进行无创、实时、靶向性的检测和监控提供有效手段;有望解决长期困扰人类健康与发展的重大关键难题,从而有效改善人类生存与生活质量。《中国激光》计划于 2010 年 10 月正刊(EI 核心收录)上推出“激光分子影像诊断与治疗监控”专题栏目,现特向国内外广大专家学者征集“激光分子影像诊断与治疗监控”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:

光学分子成像的新技术与新方法:主要包括荧光分子成像技术(FRET、FRAP、FCS等);光声成像(PAI);光学相干层析成像(OCT);激光散斑成像(LSI);微波热声成像(TAI);近红外光学漫射成像(DOT)以及太赫兹成像(THz)等。

光学分子探针与分子诊断:主要包括近红外高效光学分子探针;多模态复合纳米探针;蛋白质和多肽小分子光学探针;分子水平诊断光谱学研究(荧光、吸收、偏振和拉曼光谱等)以及基于纳米技术的高效基因检测、单分子识别等。

光学分子成像在疾病早期诊断和治疗监控中的应用:主要包括疾病早期诊断中的基础研究;肿瘤的光热、光化学治疗及其监控;低强度光子治疗技术及其机制;手术过程中的光学导航以及预后的无损伤光子学疗效评估与检测技术等。

特邀组稿专家:

邢 达 教授 华南师范大学

截稿日期:2010年6月30日

投稿方式以及格式:可通过中国光学期刊网网上投稿系统直接上传稿件(主题标明“激光分子影像诊断与治疗监控”投稿),详情请参见 <http://www.opticsjournal.net/zgjg.htm>。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,有任何问题请咨询马沂编辑,E-mail: CJL@siom.ac.cn;电话:021-69918427。