

应力调制下 β -FeSi₂ 电子结构及光学性质

闫万珺^{1,2} 张春红¹ 桂 放¹ 张忠政¹ 谢 泉² 郭本华¹ 周士芸^{1*}

¹ 安顺学院 物理与电子科学系, 贵州 安顺 561000
² 贵州大学理学院新型光电子材料与技术研究所, 贵州 贵阳 550025

摘要 采用第一性原理赝势平面波方法对应力调制下 β -FeSi₂ 的电子结构及光学性质进行了计算, 全面分析了应力对 β -FeSi₂ 能带结构、电子态密度和光学性质的影响。在各向同性应力的作用下, 压缩晶格使 β -FeSi₂ 的导带向高能区漂移, 带隙变宽, 拉伸晶格使导带向低能区漂移, 带隙变窄, 且当拉伸应力增加到 -25 GPa 时, 费米能级穿过了价带和导带, β -FeSi₂ 由半导体变成了导体; 压缩晶格会使各光学参数发生蓝移, 增大 β -FeSi₂ 的吸收系数和光电导率, 降低反射率, 而拉伸晶格会导致红移, 增大静态介电常数, 折射率 n_0 和反射率, 降低吸收系数。施加应力可以调节 β -FeSi₂ 的电子结构和光学性质, 是改变和控制 β -FeSi₂ 的光电传输性能的有效手段。

关键词 材料; β -FeSi₂; 电子结构; 光学性质; 应力; 第一性原理

中图分类号 O481.1; O472+.3; O521+.21 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS201333.0716001

Electronic Structure and Optical Properties of Stressed β -FeSi₂

Yan Wanjun^{1,2} Zhang Chunhong¹ Gui Fang¹ Zhang Zhongzheng¹

Xie Quan² Guo Benhua¹ Zhou Shiyun¹

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

Abstract A detailed theoretical study on the band structure, electronic density and optical properties of β -FeSi₂ under the isotropic stress is performed based on the first-principles pseudopotential method. The results show that the lattice constants of β -FeSi₂ change with different stress. With the compression stress increasing, the densities of Fe-d and Si-p states decrease, and the conduction bands move to higher energy while the valence bands have little change that makes the energy gap widened; when the lattice is stretched, the densities of Fe-d and Si-p states increase, and the conduction bands move to lower energy while the valence bands have little change which makes the energy gap narrow down. The valence and conduction bands are traversed by the Fermi energy when stretch stress is -25 GPa that means the semiconductor β -FeSi₂ converts to the conductor. Compressing lattice will lead to the blue shift, increase the absorption index and photoconductivity, and decrease the reflectivity. While stretching will result in the red shift, increase the static dielectric constant, refractive index n_0 and reflectivity, and decrease the absorption index. Applying stress can effectively regulate the electronic structure and optical properties of β -FeSi₂, which is an effective way to change and control the photoelectric transmission performance of β -FeSi₂.

Key words materials; β -FeSi₂; electronic structure; optical properties; stress; first-principle

OCIS codes 160.4670; 160.4760; 160.6000

收稿日期: 2013-01-06; 收到修改稿日期: 2013-03-08

基金项目: 国家自然科学基金(61264004)、贵州省科技厅自然科学基金(黔科合J字[2009]2055, [2010]2001)、贵州省教育厅科研项目(黔高教发[2011]278)、贵州省教育厅功能材料与资源化学特色重点实验室、贵州省教育厅航空电子电气与信息网络工程中心

作者简介: 闫万珺(1978—), 女, 博士研究生, 副教授, 主要从事电子功能材料方面的研究。

E-mail: yanwanjun7817@163.com

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

* 通信联系人。E-mail: s. y. zhou@163.com

1 引言

铁硅化合物 β -FeSi₂ 是一种新型的环境半导体材料,它具有光通信最适合的波长(1.55 μm),对红外波长有很高的吸收率,理论光电转换效率可达 16%~23%。自 β -FeSi₂ 在低温下波长为 1.5 μm ^[1] 和室温下波长为 1.6 μm ^[2] 的电致发光的现象被陆续报道以来,它作为最具发展前景的光电子材料而受到广泛关注。

通过掺杂或引入应力都可以改变晶体常数,从而改变材料的能带结构及其光学性质。目前,实验和理论方面已有不少通过掺杂来改变 β -FeSi₂ 能带结构的报道。如有实验研究^[3-4] 定性报道了 Co 掺杂量的增加会引起 β -FeSi₂ 带隙变窄, Mn 掺杂会导致 β -FeSi₂ 由半导体变为金属^[5], 理论研究表明: 掺入 Mn、Cr、Co、Ni、Al 等元素均会改变 β -FeSi₂ 的能带结构^[6-9], 且带隙随掺杂量的不同而改变^[10]。关于 β -FeSi₂ 在高压下的研究, 仅 Takakrabe 等^[11-15] 对高压下 β -FeSi₂ 的几何结构和吸收系数进行了研究, 指出 β -FeSi₂ 的带隙随压强的增大而增大。Tani 等^[16] 采用第一性原理对 β -FeSi₂ 在 0~60 GPa 的压强下的几何结构和弹性常数进行了研究。

对各种晶体材料施加晶格常数形变,理论上主要采用外压(流体等静压力)调制的方法来模拟。目前尚未见到应力调制对 β -FeSi₂ 的能带结构和光学性质的影响的研究。鉴于此,本文采用赝势平面波方法对应力调制下 β -FeSi₂ 的能带结构和光学性质进行研究,采用施加各向同性压力(正压强)和张力(负压强)的方法来改变其晶格常数,并对不同应力调制下的几何结构、能带结构、电子态密度和光学性质进行全面的计算。该方法已成功应用于多种材料光电特性的计算^[17-29]。

2 理论模型与计算方法

β -FeSi₂ 属于正交晶系,空间群为 Cmca,每个原胞包含 48 个原子,其中有 16 个 Fe 原子,32 个 Si 原子,晶格常数为 $a=0.9863$ nm, $b=0.7791$ nm, $c=7.833$ nm^[30]。Fe 原子和 Si 原子在原胞中各有两种不同的原子环境,即两套不等价的 Fe、Si 原子通过对称变换而构成整个晶胞。选择含有 48 个原子的原胞作为计算模型,对经过几何结构优化的模型施加各向同性的压力或张力来实现对晶格的应力调制。

采用基于第一性原理的赝势平面波方法进行计

算,主要的计算工作由 CASTEP^[31] 软件包完成。首先将应力调制后的体系用 BFGS 算法^[32-35] (由 Broyden, Fletcher, Goldfarb 和 Shannon 提出的对固定外应力的晶胞进行结构优化的算法)进行几何结构优化,得到体系的稳定结构。在晶格参数和原子位置都优化的情况下,再计算不同应力调制下的能带结构、电子能态密度和光学性质。计算中采用广义梯度近似(GGA)的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)^[36] 泛函来处理电子间的交换关联能;采用超软赝势^[37] 处理离子实与电子间的相互作用。选取 Si 的 $3s^2 3p^2$, Fe 的 $3d^6 4s^2$ 组态电子作为价电子,其余轨道电子作为芯电子进行计算。在总能量和电荷密度的计算中,平面波的截断能量设置为 300 eV,自洽计算收敛精度设置为每个原子 1 meV,布里渊区的积分采用了 $3 \times 3 \times 3$ 的 Monkhorst-Pack 形式^[38] 高对称 k 点方法。

3 结果与讨论

3.1 几何结构

表 1 为未施加应力和施加应力的 β -FeSi₂ 晶格常数。由表 1 可知,当施加各向同性的压力时,晶格常数随压强的增大而减小,当施加各向同性的张力时,晶格常数随压强的增大而增大。

表 1 未施加应力和施加应力的 β -FeSi₂ 晶格常数

Table 1 Unstressed and stressed lattice constants

of β -FeSi₂

Sample	a / nm	b / nm	c / nm
Unstressed ^[30]	0.9863	0.7791	0.7833
5 GPa	0.9799	0.7684	0.7727
10 GPa	0.9695	0.7630	0.7668
15 GPa	0.9612	0.7584	0.7612
20 GPa	0.9530	0.7545	0.7561
-5 GPa	1.0045	0.7805	0.7871
-10 GPa	1.0141	0.7890	0.7964
-15 GPa	1.0328	0.7991	0.8074
-20 GPa	1.0535	0.8121	0.8235
-22 GPa	1.0667	0.8191	0.8322
-24 GPa	1.0878	0.8289	0.8420
-25 GPa	1.1126	0.8375	0.8543

3.2 电子结构

3.2.1 能带结构

图 1 为晶格和原子位置都经过优化后得到的压缩晶格和拉伸晶格时 β -FeSi₂ 的能带结构。图 1(a) 为施加压力的情况,从图中可以看出,对 β -FeSi₂ 的晶格施加各向同性压力后,导带和价带均向上平移,

但价带顶仍在 Y 点处,而导带底随着压力的增大向高能方向移动,因此带隙随压力的增大而变宽,从未施加应力时的 0.78 eV 增大到 20 GPa 时的 1.01 eV,与 Takakrabe 等^[11-15]的结果一致。图 1(b)为施加张力的情况, Δ 对应没有施加应力时导带底的最低点。由图可知,随着张力从 -5 GPa 增大到 -24 GPa,导带逐渐

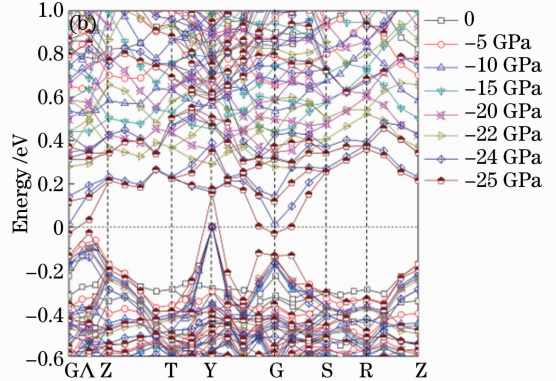
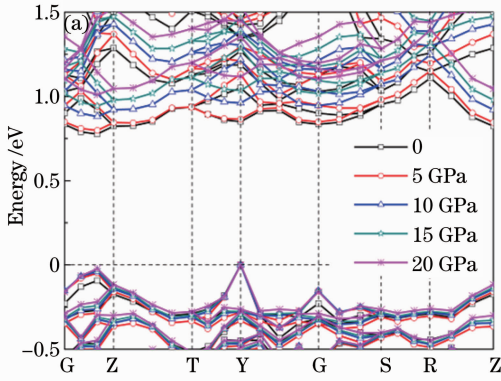


图 1 应力调制下 β -FeSi₂ 费米能级附近的能带结构。(a)压缩晶格;(b)拉伸晶格

Fig. 1 Band structure of stressed β -FeSi₂ near the Fermi energy. (a) Compressed lattice; (b) stretched lattice

图 2 为直接带隙和间接带隙值随应力变化的关系。由图 2 可知,直接带隙与间接带隙之差随压力的增大而增大,随张力的增大而减小。当张力增大到 -25 GPa 时, β -FeSi₂ 由半导体变成了导体。因此,通过调节外压,可以对 β -FeSi₂ 的能带结构进行调节,达到优化其电学性质和光学性质的目的。

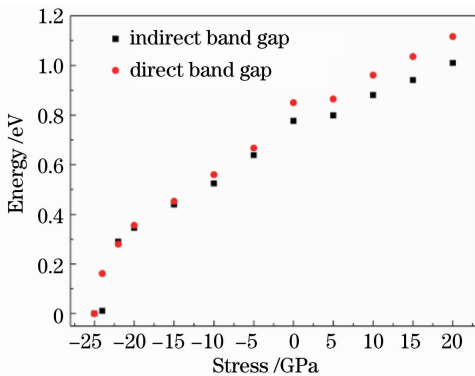


图 2 直接带隙和间接带隙随应力的变化

Fig. 2 Change of the direct and indirect band gaps with stress

3.2.2 电子态密度

在费米能级附近, β -FeSi₂ 的态密度主要由 Si-p 和 Fe-d 态电子的能态密度决定^[39]。图 3 为晶格在各向同性的应力调制下 β -FeSi₂, Fe-d 和 Si-p 电子的总态密度和分波态密度(PDOS)。从图 3(a), (c), (e)可以看出,随着压力的增大,总态密度、Fe-d 和 Si-p 的分波态密度对应的峰值逐渐减小,在费

向下平移,价带顶仍在 Y 点,带隙随张力的增大而减小,从未施加张力时的 0.78 eV 减小到 -24 GPa 时的 0.01 eV, β -FeSi₂ 几乎变成了导体,当张力增大到 -25 GPa 时,费米能级穿过了价带和导带,此时 β -FeSi₂ 已经转变成了导体。

米能级附近,导带向高能区漂移,价带变化甚微,因而带隙变宽;从图 3(b), (d), (f)可以看出,随着张力的增大,总态密度、Fe-d 和 Si-p 的分波态密度对应的峰值逐渐增大,在费米能级附近,导带向低能区漂移,价带变化甚微,因而带隙变窄,当应力达到 -25 GPa 时,Fe-d 和 Si-p 态密度已经越过费米能级, β -FeSi₂ 变成了导体。

3.3 光学性质

当应力施加到 -25 GPa 时, β -FeSi₂ 已转变为导体,所用软件 CASTEP 不适于计算导体的性质,所以关于光学性质的计算(smearing 为 0.5)和讨论不包含应力为 -25 GPa 的情况。

3.3.1 复介电函数

图 4 为应力调制下 β -FeSi₂ 的复介电函数实部和虚部。由图 4(a)可知,当压力分别为 0, 5, 10, 15, 20 GPa 时,对应的静态介电常数 $\epsilon_1(0)$ 的值依次为 13.53, 13.56, 12.69, 12.11, 11.61;当张力分别为 -5, -10, -15, -20, -22, -24 GPa 时,对应的静态介电常数的值依次为 15.76, 17.57, 20.61, 24.31, 26.62, 32.44。可见压缩晶格会使介电常数减小而拉伸晶格可以增大介电常数。介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 的第一峰由价带顶到导带底的电子跃迁产生,它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他各种光谱信息。从图 4(b)可以看到,当压力分别为 0, 5, 10, 15,

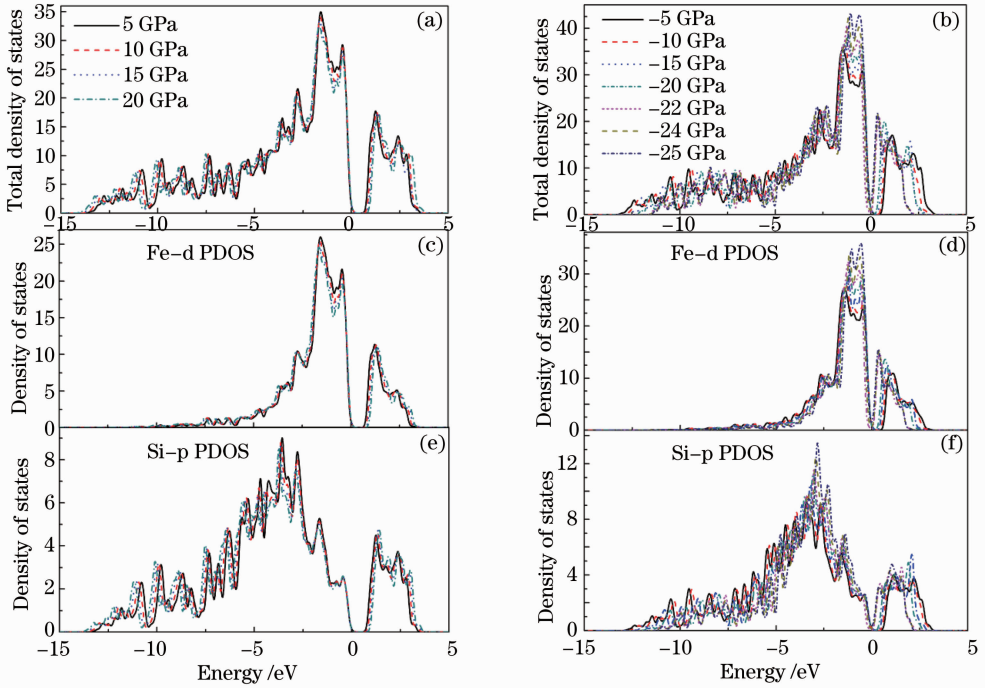


图 3 应力调制下 β -FeSi₂ 的态密度。(a), (b)总态密度; (c)~(f)分波态密度

Fig. 3 Density of states of stressed β -FeSi₂. (a), (b) Total density of states; (c)~(f) partial density of states

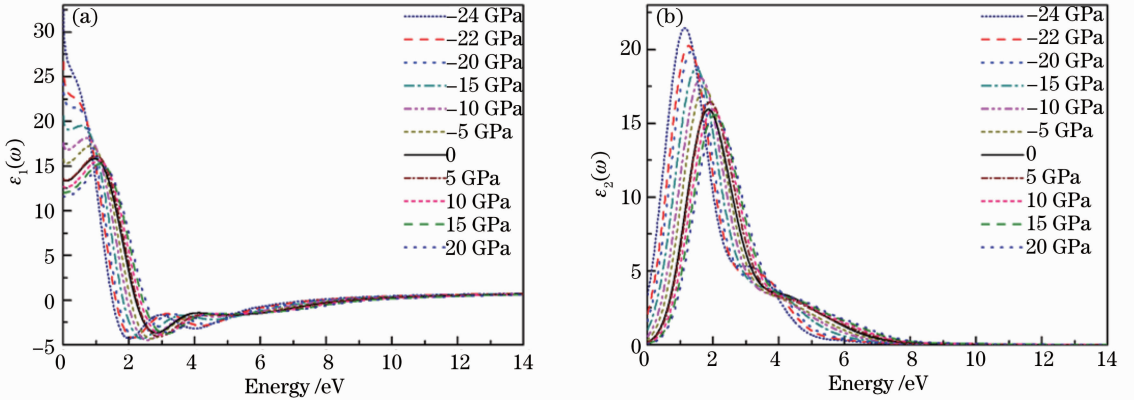


图 4 应力调制下 β -FeSi₂ 的复介电函数。(a)实部 $\epsilon_1(\omega)$; (b)虚部 $\epsilon_2(\omega)$

Fig. 4 Complex dielectric function of stressed β -FeSi₂. (a) Real part $\epsilon_1(\omega)$; (b) imaginary part $\epsilon_2(\omega)$

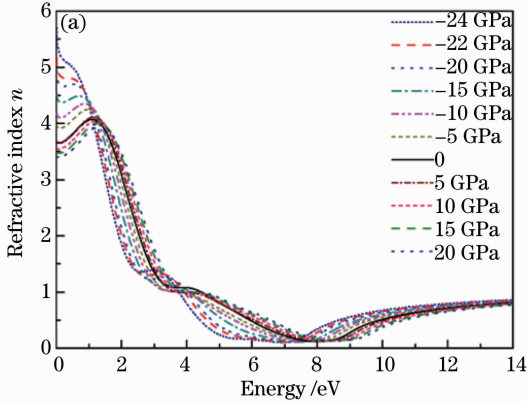
20 GPa时,对应的 $\epsilon_2(\omega)$ 的第一峰对应的光子能量依次为 1.86, 1.91, 2.0, 2.07, 2.13 eV;当张力分别为 -5, -10, -15, -20, -22, -24 GPa 时,对应的 $\epsilon_2(\omega)$ 的第一峰对应的光子能量依次为 1.73, 1.63, 1.50, 1.34, 1.26, 1.15 eV。可见,当压缩晶格时, $\epsilon_2(\omega)$ 的第一峰向高能区漂移,而拉伸晶格时,介电函数的虚部向低能区漂移,这与计算得到的能带结构和电子态密度的变化是一致的:压缩使带隙变宽,导带的电子态密度远离费米能级,而拉伸使带隙变窄,导带的电子态密度向费米能级靠近。

3.3.2 复折射率

由公式 $\epsilon_1 = n^2 - k^2$ 和 $\epsilon_2 = 2nk$, 可以从复介电函

数得到 β -FeSi₂ 的复折射率。图 5 为应力调制下 β -FeSi₂ 的折射率 n 和消光系数 k 。由图 5(a)可知,当压力分别为 0, 5, 10, 15, 20 GPa 时,对应的折射率 n_0 依次为 3.67, 3.68, 3.56, 3.48, 3.41;当张力分别为 -5, -10, -15, -20, -22, -24 GPa 时,对应的折射率 n_0 依次为 3.97, 4.19, 4.54, 4.93, 5.16, 5.70, 并且当光子能量依次位于 7.68~7.89 eV, 7.46~7.79 eV, 7.17~7.68 eV, 6.89~7.47 eV, 6.74~7.38 eV 和 6.53~7.24 eV 时,折射率达到最小值,这与下文所述反射谱中该能量范围的反射率趋于最大值的能量范围是对应的,表明各向同性拉伸作用下的 β -FeSi₂ 在这些能量范围分别呈现出

一定的金属反射特性,且出现金属反射特性的能量区域随着拉伸应力的增大而增大,反之施加压力时,没有表现出明显的金属反射特性。折射率 n_0 的值与图 4(a)中静态介电常数 $\epsilon_1(0)$ 的计算结果是完全对应的[$n_0^2 = \epsilon_1(0)$]。可见压缩晶格会使折射率减小,而拉伸晶格可以增大折射率。由图 5(b)可知,



消光系数 k 随着压力的增大而向高能方向漂移,峰值逐渐减小,随张力的增大向低能方向漂移,且在 3.5~4.6 eV 能量范围依次出现了第二个消光系数峰,第一峰和第二峰的峰值逐渐增大,漂移的能量大小等于能带增大或减小的数值。

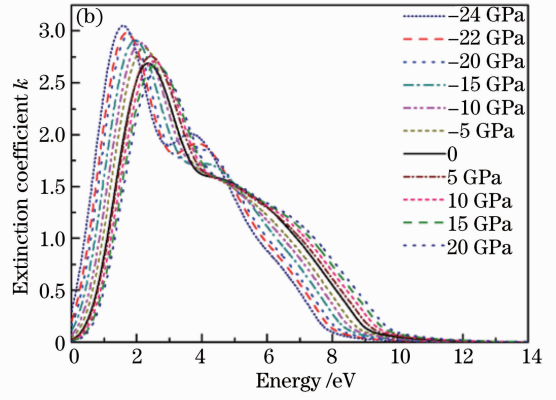


图 5 应力调制下 β -FeSi₂ 的复折射率。(a)折射率 n ; (b)消光系数 k

Fig. 5 Complex refractive index of stressed β -FeSi₂. (a) Refractive index n ; (b) extinction coefficient k

3.3.3 吸收谱

根据吸收系数和介电函数的关系 $\alpha(\omega) = \frac{\omega}{nc} \epsilon_2(\omega)$,可以得到 β -FeSi₂ 的吸收系数。图 6 为应力调制下 β -FeSi₂ 的吸收谱。从图 6 可以看出, β -FeSi₂ 有两个吸收峰,吸收峰的值和对应的光子能量随着应力的变化而变化。当压力分别为 0,5,10,15,20 GPa 时,第一吸收峰随压力增大而增大,且峰值对应的能量向高能方向漂移,在入射光能量依次为 5.78,5.96,6.19,6.37,6.53 eV 处,吸收系数取得最大值,依次为 1.27×10^5 , 1.25×10^5 , 1.28×10^5 , 1.30×10^5 , 1.32×10^5 cm^{-1} ; 当张力分别为 -5,-10,-15,-20,-22,-24 GPa 时,第一吸收峰随张力增大而减小,且峰值对应的能量向低能方向漂

移,在入射光能量依次为 5.49,5.18,4.79,4.48,4.35,4.17 eV 处,吸收系数取得最大值,依次为 1.21×10^5 , 1.20×10^5 , 1.23×10^5 , 1.27×10^5 , 1.27×10^5 , 1.27×10^5 cm^{-1} 。可见压缩晶格使吸收峰发生蓝移而拉伸晶格使吸收峰发生红移,但压缩和拉伸晶格对 β -FeSi₂ 的吸收系数值影响不大。

3.3.4 反射谱

根据反射率与复折射率的关系 $R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}$ 可以计算得到反射谱。图 7 为应力调制下 β -FeSi₂ 的反射谱。从图 7 可以看出,当压力分别为 0,5,10,15,20 GPa 时,反射主要发生在能量为 8~8.4 eV 的范围,并且随着压力的增大,反射峰向高能方向漂移,且反射峰值逐渐降低,反射小于

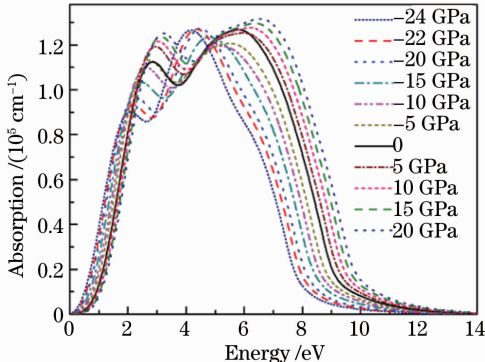


图 6 应力调制下 β -FeSi₂ 的吸收谱

Fig. 6 Absorption spectra of stressed β -FeSi₂

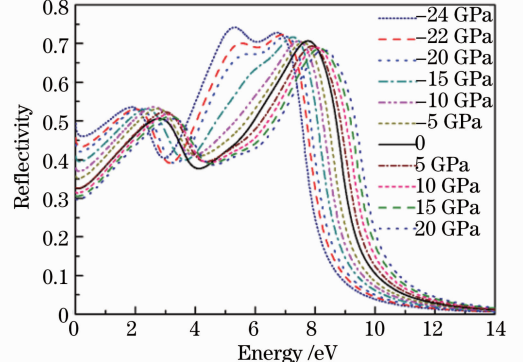


图 7 应力调制下 β -FeSi₂ 的反射谱

Fig. 7 Reflectivity spectra of stressed β -FeSi₂

70%；当张力分别为-5, -10, -15, -20, -22, -24 GPa时,发生反射的能量范围逐渐增大,依次为7.68~7.89 eV, 7.46~7.79 eV, 7.17~7.68 eV, 6.89~7.47 eV, 6.74~7.38 eV, 6.53~7.24 eV,反射逐渐增强且向低能方向漂移。可见压缩晶格可以减小 β -FeSi₂的金属反射特性,而拉伸晶格会增大反射。反射谱与前面计算得到的折射率 n 是完全对应的。

3.3.5 光电导率

光电导率描述了光照引起半导体电导率改变的现象,是光电子材料的一个重要参数。图8为应力调制下 β -FeSi₂的光电导率 $\sigma_1(\omega)$ 。

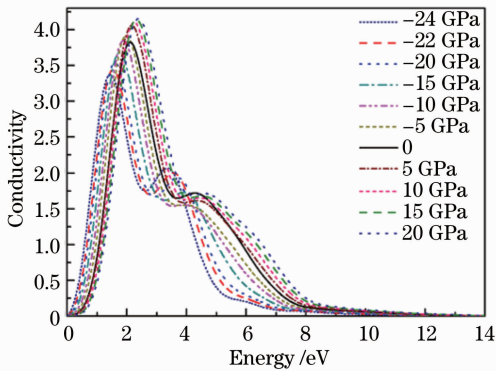


图8 应力调制下 β -FeSi₂的光电导率

Fig. 8 Conductivity of stressed β -FeSi₂

从图8可以看出,当压力分别为0, 5, 10, 15, 20 GPa时, $\sigma_1(\omega)$ 在光子能量为2.11, 2.17, 2.26, 2.33, 2.40 eV处分别达到最大值3.83, 4.06, 4.10, 4.14, 4.15;当张力分别为-5, -10, -15, -20, -22, -24 GPa时, $\sigma_1(\omega)$ 在光子能量为1.99, 1.89, 1.77, 1.61, 1.54, 1.44 eV处分别达到最大值3.92, 3.85, 3.68, 3.54, 3.44, 3.37。可见压缩晶格使得 β -FeSi₂的光电导率增加并向高能方向漂移,而拉伸使之减小并向低能方向偏移。与介电函数的虚部和吸收系数进行对比发现,它们出现峰值的位置对应的能带区间基本一致,验证了它们之间的相互关系。

3.3.6 能量损失函数

图9为应力调制下 β -FeSi₂的能量损失函数。从图9可知,当压力分别为0, 5, 10, 15, 20 GPa时,在光子能量为8.82, 8.99, 9.18, 9.34, 9.50 eV处依次出现能量损失函数的最大值;当张力分别为-5, -10, -15, -20, -22, -24 GPa时,在光子能量为8.57, 8.37, 8.18, 7.94, 7.79, 7.42 eV处依次出现能量损失函数的最大值。可见压缩晶格使 β -FeSi₂的能量损失函数向高能方向漂移,而拉伸晶格使之

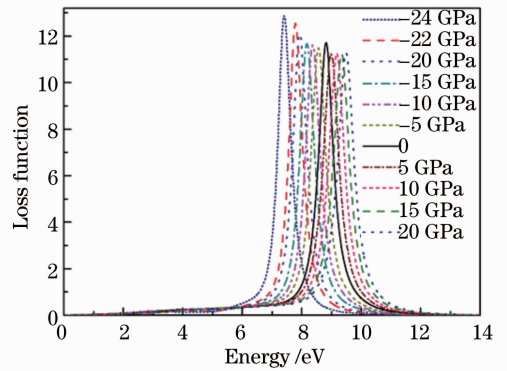


图9 应力调制下 β -FeSi₂的能量损失函数

Fig. 9 Energy loss function of stressed β -FeSi₂

向低能方向漂移,且当张力为-24 GPa时能量损失函数最大。

4 结 论

采用基于密度泛函理论的赝势平面波方法,对各向同性应力作用下 β -FeSi₂的几何结构、电子结构、复介电函数、复折射率、吸收系数、反射率、光电导率等光学性质进行了全面的计算和分析。在各向同性应力的作用下,压缩晶格使在电子态密度中占主导地位的Fe-d和Si-p电子对应的峰值逐渐减小,导带向高能区漂移,带隙变宽,拉伸晶格时,Fe-d和Si-p态密度对应的峰值逐渐增大,导带向低能区漂移,带隙变窄,且当拉伸应力施加到-25 GPa时, β -FeSi₂的费米能级穿过了价带和导带,对应着Fe-d和Si-p态密度越过费米能级, β -FeSi₂由半导体变成了导体。压缩晶格会使各光学参数发生蓝移,增大 β -FeSi₂的吸收系数和光电导率,降低反射率,拉伸晶格会使各光学参数发生红移,增大静态介电常数、折射率 n_0 和反射率,降低吸收系数。综上所述,施加应力可以调节 β -FeSi₂的电子结构,是改变和控制 β -FeSi₂的光电传输性能的有效手段。

参 考 文 献

- 1 C A Dimitriadis, J H Werner, S Logothetidis, *et al.*. Electronic properties of semiconducting FeSi₂ films[J]. J Appl Phys, 1990, 68(4): 1726-1734.
- 2 T Suemasu, Y Negishi, K Takakura, *et al.*. Influence of Si growth temperature for embedding β -FeSi₂ and resultant strain in β -FeSi₂ on light emission from p-Si/ β -FeSi₂ particles/n-Si light-emitting diodes[J]. Appl Phys Lett, 2001, 79(12): 1804-1806.
- 3 D Panknin, E Wieser, W Skorupa, *et al.*. Buried (Fe_{1-x}Co_x) Si₂ layers with variable band gap formed by ion beam synthesis[J]. Appl Phys A, 1996, 62(2): 155-162.
- 4 M Fanciulli, A Zenkevich, G Weyer, *et al.*. Structural and optical properties of Fe_{1-x}M_xSi₂ thin films (M=Co, Mn; 0≤x≤0.20) [J]. Microelectron Eng, 2001, 55(1): 233-241.
- 5 I Nishida. Study of semiconductor-to-metal transition in Mn-

- doped FeSi₂[J]. Phys Rev B, 1973, 7(6): 2710–2713.
- 6 Yan Wanjun, Xie Quan. First principle calculation of the electronic structure and optical properties of impurity-doped β -FeSi₂ semiconductors[J]. Chinese J Semiconductors, 2008, 29(6): 1141–1146.
闫万珺, 谢 泉. 掺杂 β -FeSi₂ 的电子结构及光学性质的第一性原理研究[J]. 半导体学报, 2008, 29(6): 1141–1146.
- 7 J Tani, H Kido. Geometrical and electronic structures of β -FeSi_{1.875}X_{0.125} (X = B, N, Al or P) [J]. Jpn J Appl Phys, 2002, 41(11A): 6426–6429.
- 8 Z J Pan, L T Zhang, J S Wu. First-principles study of electronic and geometrical structures of semiconducting β -FeSi₂ with doping [J]. Mater Sci Eng B, 2006, 131(1-3): 121–126.
- 9 J Tani, H Kido. First principle calculation of the geometrical and electronic structure of impurity-doped β -FeSi₂ semiconductors[J]. J Solid State Chem, 2002, 163(1): 248–252.
- 10 Yan Wanjun, Zhou Shiyun, Xie Quan, *et al.*. First principles study of electronic structure and optical properties for Co-doped β -FeSi₂[J]. Acta Optica Sinica, 2011, 31(6): 0616003.
闫万珺, 周士芸, 谢 泉, 等. Co 掺杂 β -FeSi₂ 电子结构及光学性质的第一性原理研究[J]. 光学学报, 2011, 31(6): 0616003.
- 11 K Takakrabe, R Teranishi, J Oinuma, *et al.*. Electronic properties of β -FeSi₂ under pressure [J]. J Phys: Condens Matter, 2002, 14(44): 11007–11010.
- 12 K Takakrabe, T Ikai, Y Mori, *et al.*. Structural study of FeSi₂ under pressure[J]. J Appl Phys, 2004, 96(9): 4903–4908.
- 13 K Takakrabe, R Teranishi, J Oinuma, *et al.*. Optical properties of β -FeSi₂ under pressure [J]. Phys Rev B, 2002, 65(16): 165215.
- 14 K. Takakrabe, R. Teranishi, J. Oinuma, *et al.*. Optical absorption spectra of β -FeSi₂ under pressure[J]. Phys. Stat. Sol. (b), 2001, 223(1): 259–263.
- 15 Y Mori, T Ikai, R Teranishi, *et al.*. Electronic and structural study of β -FeSi₂ under high pressure [J]. Phys Stat Sol (b), 2003, 235(2): 302–306.
- 16 J Tani, M Takahashi, H Kido. First-principles calculations of the structural and elastic properties of β -FeSi₂ at high-pressure [J]. Intermetallics, 2010, 18(6): 1222–1227.
- 17 Q Chen, Q Xie, F J Zhao, *et al.*. First-principles calculations of electronic structure and optical properties of strained Mg₂Si [J]. Chin Sci Bull, 2010, 55(21): 2236–2242.
- 18 S Y Zhou, Q Xie, W J Yan, *et al.*. First-principle study on the electronic structure of stressed CrSi₂[J]. Sci China Ser G, 2009, 52(1): 76–81.
- 19 Li Chunxia, Dang Suihu, Zhang Keyan, *et al.*. Influence of pressure effect on CdS electronic structure and optical properties [J]. Acta Optica Sinica, 2011, 31(6): 0616004.
李春霞, 党随虎, 张可言, 等. 压力效应对 CdS 电子结构和光学性质的影响[J]. 光学学报, 2011, 31(6): 0616004.
- 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 Yan Wanjun, Zhou Shiyun, Xie Quan, *et al.*. Effect of Al doping concentration effect on electronic and optical properties of CrSi₂ [J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(5): 0516003.
闫万珺, 周士芸, 谢 泉, 等. Al 掺杂浓度对 CrSi₂ 电子结构和光学性质的影响[J]. 光学学报, 2012, 32(5): 0516003.
- 22 Zhang Fuchun, Zhang Zhiyong, Zhang Weihu, *et al.*. First-principles calculation of electronic structure and optical properties of AZO(ZnO:Al) [J]. Acta Optica Sinica, 2009, 29(4): 1025–1031.
张富春, 张志勇, 张威虎, 等. AZO(ZnO:Al) 电子结构与光学性质的第一性原理计算[J]. 光学学报, 2009, 29(4): 1025–1031.
- 23 Cai Jianqiu, Tao Xiangming, Luo Haijun, *et al.*. *Ab-initio* investigation of anisotropic optical properties of Sr₂RuO₄ [J]. Acta Optica Sinica, 2010, 30(12): 3580–3585.
蔡建秋, 陶向明, 罗海军, 等. Sr₂RuO₄ 各向异性光学性质的第一性原理研究[J]. 光学学报, 2010, 30(12): 3580–3585.
- 24 Li Chunxia, Dang Suihu, Han Peide. Vacancies effects on electronic structure and optical properties of CdS [J]. Acta Optica Sinica, 2010, 30(5): 1406–1412.
李春霞, 党随虎, 韩培德. 空位缺陷对 CdS 电子结构和光学性质的影响[J]. 光学学报, 2010, 30(5): 1406–1412.
- 25 Cheng Zhengze, Xu Bin, Wu Siqing. Electronic structure and optical properties of NaPd₃O₄ [J]. Chinese J Lasers, 2009, 36(8): 2126–2129.
程正则, 徐 斌, 吴四清. NaPd₃O₄ 的电子结构和光学性质[J]. 中国激光, 2009, 36(8): 2126–2129.
- 26 Zhou Guanggang, Lu Guiwu, Yu Yinghui, *et al.*. Calculation for linear and nonlinear optical properties of LBO crystals [J]. Chinese J Lasers, 2010, 37(5): 1342–1346.
周广刚, 卢贵武, 于迎辉, 等. LBO 晶体线性和非线性光学性质的计算[J]. 中国激光, 2010, 37(5): 1342–1346.
- 27 Cui Dongmeng, Jia Rui, Xie Quan, *et al.*. First principle calculation of the electronic structure and optical properties of Rh-doped Ru₂Si₃ semiconductors [J]. Chinese J Luminescence, 2012, 33(9): 960–965.
崔冬萌, 贾 锐, 谢 泉, 等. Rh 掺杂的 Ru₂Si₃ 的电子结构及光学性质[J]. 发光学报, 2012, 33(9): 960–965.
- 28 Cui Dongmeng, Jia Rui, Xie Quan, *et al.*. First principle calculation of stressed Ru₂Si₃ [J]. Chinese J Luminescence, 2011, 32(9): 907–912.
崔冬萌, 贾 锐, 谢 泉, 等. Ru₂Si₃ 在应力作用下的第一性原理研究[J]. 发光学报, 2011, 32(9): 907–912.
- 29 Li Ping, Xin Chuanzhen, Xu Jianping, *et al.*. Calculation and experimental verification for Zn_{1-x}Cd_xS ternary mixed crystals on electronic structures and optical properties [J]. Chinese J Luminescence, 2012, 33(7): 720–728.
李 萍, 辛传祯, 徐建萍, 等. Zn_{1-x}Cd_xS 三元混晶的电子结构及光学性质计算与实验验证[J]. 发光学报, 2012, 33(7): 720–728.
- 30 Y Dusausoy, J Protas, R Wandji, *et al.*. Structure cristalline du disilicure de fer, FeSi₂[J]. Acta Crystallogr, Sect B; Struc Sci, 1971, 27(6): 1209–1218.
- 31 M D Segall, P J D Lindan, M Probert, *et al.*. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code [J]. J Phys: Condens Matter, 2002, 14(11): 2717–2744.
- 32 C G Broyden. The convergence of a class of double-rank minimization algorithms 2. The new algorithm [J]. IMA J Appl Math, 1970, 6(3): 222–231.
- 33 R Fletcher. A new approach to variable metric algorithms [J]. The Computer Journal, 1970, 13(3): 317–322.
- 34 D Goldfarb. A family of variable metric methods derived by variational means [J]. Math Comp, 1970, 24(109): 23–26.
- 35 D F Shannon. Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization [J]. Math Comp, 1970, 24(111): 647–656.
- 36 J P Perdew, K Burke, M Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple [J]. Phys Rev Lett, 1996, 77(18): 3865–3868.
- 37 D Vanderbilt. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism [J]. Phys Rev B, 1990, 41(11): 7892–7895.
- 38 H J Monkhorst, J D Pack. Special points for Brillouin-zone integrations [J]. Phys Rev B, 1976, 13(12): 5188–5192.
- 39 Yan Wanjun, Xie Quan, Zhang Jinmin, *et al.*. Interband optical transitions in semiconducting iron disilicide β -FeSi₂ [J]. Chinese J. Semiconductors, 2007, 28(9): 1381–1387.
闫万珺, 谢 泉, 张晋敏, 等. 铁硅化合物 β -FeSi₂ 带间光学跃迁的理论研究[J]. 半导体学报, 2007, 28(9): 1381–1387.