

Ac 掺杂 β -FeSi₂ 光电性质的第一性原理研究

张春红^{1,3} 张忠政^{2,3*} 闫万珺^{2,3} 周士芸^{2,3} 桂 放^{2,3} 郭本华^{2,3}

¹ 安顺学院数理学院, 贵州 安顺 561000
² 安顺学院电子与信息工程学院, 贵州 安顺 561000
³ 安顺学院航空电子电气与信息网络工程中心, 贵州 安顺 561000

摘要 基于密度泛函理论(DFT)框架下的第一性原理赝势平面波方法,对铜(Ac)掺杂 β -FeSi₂ 的几何结构,电子结构和光学性质进行了计算与分析。几何结构的计算表明:Ac 掺杂后 β -FeSi₂ 晶格常数 a 、 b 及 c 都有所变化,晶胞体积增大。电子结构的计算表明:Ac 掺入后导致费米面进入导带,能带结构仍为准直接带隙,但是带隙明显变窄;费米能级附近,总电子态密度主要由 Fe 的 3d 层和 Si 的 3p 层电子态密度决定,Ac 的 6d 层电子态密度贡献很小。光学性质的计算表明:静态介电常数 $\epsilon_1(0)$ 明显提高,介电函数的虚部 ϵ_2 的峰值向低能方向移动并且减弱,折射率 n_0 明显提高,消光系数 k 向低能方向有一微小的偏移,吸收峰增强,平均反射效应变化不大,计算结果为 β -FeSi₂ 材料掺杂改性的实验研究提供了理论依据。

关键词 材料; β -FeSi₂;电子结构;光学性质;掺杂;第一性原理

中图分类号 O474; O472⁺.3 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS201434.1116002

Study on First Principle of Photoelectrical Properties of Ac Doped β -FeSi₂

Zhang Chunhong^{1,3} Zhang Zhongzheng^{2,3} Yan Wanjun^{2,3} Zhou Shiyun^{2,3}
Gui Fang^{2,3} Guo Benhua^{2,3}

¹ College of Mathematics and Science, Anshun University, Anshun, Guizhou 561000, China

² College of Electronic and Information Engineering, Anshun University, Anshun, Guizhou 561000, China

³ Engineering Center of Avionics Electrical and Information Network, Anshun University,

Anshun, Guizhou 561000, China

Abstract By using the first principle pseudo-potential plane-wave method based on the density function theory (DFT), the geometrical structure, electronic structure and optical properties of β -FeSi₂ with doping Ac are calculated and analyzed. The calculated results of the geometrical structure show that the lattice constants a , b and c change, the volume of lattice expands. Electronic structure calculation indicates that the Fermi energy moves to conduction band, the band structure is still quasi-direct bandgap, which becomes narrow obviously. The density of state near the Fermi energy level is mainly composed of Fe-3d and Si-3p, Ac-6d only devoted to a small part. Optical properties calculation indicates that the static dielectric constant $\epsilon_1(0)$ increases. The peak of the imaginary part of dielectric function ϵ_2 decreases and moves to a lower energy. The refractive index n_0 increases significantly and k moves to a lower energy. Optical absorption coefficient increases. The average reflective effect has little change. These results offer theoretical data for doping of β -FeSi₂.

Key words materials; β -FeSi₂; electronic structure; optical property; doping; first principle

OCIS codes 160.4670; 160.4760; 160.6000; 160.6990

收稿日期: 2014-05-05; 收到修改稿日期: 2014-07-01

基金项目: 贵州省科学技术厅、安顺市人民政府、安顺学院联合科技基金资助项目[黔科合 J 字 LKA(2012)15 号]、贵州省科技厅自然科学基金[黔科合 J 字(2010)2001]、贵州省教育厅 2011 州市地普通本科高校教育质量提升项目[黔高教发 KY(2011)278 号]、安顺学院 2013 年度青年项目(2013AQ08)

作者简介: 张春红(1982—),女,硕士,副教授,主要从事光电子材料计算方面的研究。E-mail: huimou1982@163.com

* 通信联系人。E-mail: zzz8292@163.com

1 引言

随着社会的发展,由于一些传统的半导体器件(如晶体二极管)已经不能满足人们的需求,因此相应的出现了很多的新型半导体器件,如半导体传感器、LED、太阳能电池等器件。硅是现代半导体器件和大规模集成电路的主要材料,而它又是一种间接带隙半导体,使硅基材料难以应用于光电子器件,因此迫使学术界不断的探索研究关于硅基半导体新型材料。铁硅化合物 $\beta\text{-FeSi}_2$ 是一种新型环境友好半导体材料,具有 $E_g=0.70\sim 0.90\text{ eV}^{[1-3]}$ 的准直接带隙,具有光通信最适合的红外线波长($1.55\ \mu\text{m}$),被认为是制备硅基光电子器件的重要材料之一。为此, $\beta\text{-FeSi}_2$ 被视为光传感器、太阳能电池的理想材料。

掺杂能够调制材料的电子结构并改变其光电性能。因此对光电材料掺杂改性的理论研究具有重大科学指导意义。目前,已有不少关于 $\beta\text{-FeSi}_2$ 掺杂改性的研究,如李伟文等^[4]对掺轻元素 N 的 $\beta\text{-FeSi}_2$ 基热电材料的电学性能进行了实验研究,发现 N 的掺入提高了 $\beta\text{-FeSi}_2$ 基热电材料的电学性能;潘志军等^[1,5]利用第一性原理对 Fe 侧 Co 掺杂及 Si 侧 Al 掺杂 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的电子结构和几何结构进行了计算,得出结论:Co 掺杂后使 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的费米面向导带偏移,导电类型为 n 型;Al 掺杂后使 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的费米面向价带偏移,导电类型为 p 型;闫万珺等^[6]利用第一性原理对 Mn, Cr, Co, Ni 掺杂 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的电子结构和光学性质进行了计算,得出结论: Mn, Cr 掺杂使 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的费米面向价带偏移, Co, Ni 掺杂使 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的费米面向导带偏移,费米面附近载流子浓度增大,光学性质发生改变。作者也曾利用第一性原理先后研究了 C 及稀土元素 La 掺杂 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的电子结构和光学性质^[7-8],得出结论: C 掺杂后 $\beta\text{-FeSi}_2$ 晶胞体积减小,禁带宽度变窄,静态介电常数减小,吸收系数降低。稀土 La 掺杂后 $\beta\text{-FeSi}_2$ 晶胞体积增大,禁带宽度变窄,态密度峰值减小,费米面附近载流子浓度显著增大。可见,对 $\beta\text{-FeSi}_2$ 掺杂不同类型元素的研究已成为该材料的一个研究热点。铜系元素由于其独特的电子成键结构及其丰富的物理化学特性是核能技术的重要研究对象。但关于铜系元素掺杂 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的理论研究几乎没有。基于此,本文采用广泛应用于材料结构设计和性能计算的第一性原理赝势平面波方法^[9-11],对掺入铜系元素 Ac 的 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的电子结构及其光学性质进行理论研究,并从理论上分析 Ac 对其光学性质的影响机制,为全面研究新型环境友好半导体光电材料 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的掺杂改性的实验研究提供理论依据。

计算采用的模型 $\beta\text{-FeSi}_2$ 属正交晶系,空间群为 $Cmca$,晶格常数为 $a=0.9863\text{ nm}$, $b=0.7791\text{ nm}$, $c=0.7833\text{ nm}^{[12]}$,每个单胞内含 48 个原子,有 4 种非同原子^[1]。其中 FeI 及 FeII 原子有 16 个, SiI 及 SiII 原子有 32 个。计算时选用一个 Ac 原子取代 FeI 和 FeII 位的一个 Fe 原子进行置换作为掺杂模型,如图 1 所示。

2 计算模型与方法

计算采用的模型 $\beta\text{-FeSi}_2$ 属正交晶系,空间群为 $Cmca$,晶格常数为 $a=0.9863\text{ nm}$, $b=0.7791\text{ nm}$, $c=0.7833\text{ nm}^{[12]}$,每个单胞内含 48 个原子,有 4 种非同原子^[1]。其中 FeI 及 FeII 原子有 16 个, SiI 及 SiII 原子有 32 个。计算时选用一个 Ac 原子取代 FeI 和 FeII 位的一个 Fe 原子进行置换作为掺杂模型,如图 1 所示。

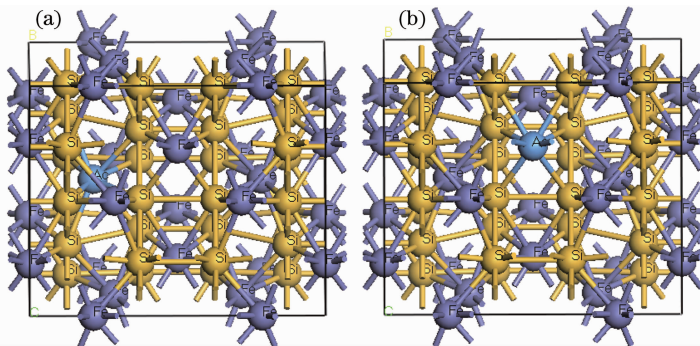


图 1 Ac 掺杂 $\beta\text{-FeSi}_2$ 。(a) FeI 位;(b) FeII 位

Fig. 1 Ac doped $\beta\text{-FeSi}_2$. (a) Site of FeI; (b) site of FeII

采用的计算方法是基于密度泛函理论(DFT)框架下的第一性原理赝势平面波方法,主要的计算工作由 Castep 软件包^[13]完成。计算中采用超软赝势^[14]来处理离子实与电子间的相互作用,选取广义梯度近似(GGA)的 Perdew Burke Ernzerhof (PBE)^[15]来处理电子交换关联能。计算选取了 Fe

的 $3d^4 4s^2$ 、Si 的 $3s^2 3p^2$ 和 Ac 的 $6d^1 7s^2$ 为价电子,设定平面波的截断能为 500 eV ,在总能量的计算中,布里渊区积分采用了 $1\times 2\times 2$ 的 Monkhorst-Pack 形式^[16]的对称特殊 k 点方法,单胞总能量收敛于 $2\times 10^{-6}\text{ eV}$ 。

3 计算结果与讨论

3.1 几何结构

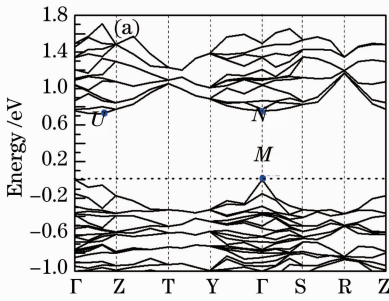
表 1 是用 BFG 算法^[17] 优化后得到的 Ac 掺杂前后 β -FeSi₂ 晶格常数及总能量。由表 1 可以看出: 一个 Ac 原子置换一个 Fe 原子后, β -FeSi₂ 的晶格常

表 1 Ac 掺杂前后的 β -FeSi₂ 优化晶格常数及总能量

Table 1 Lattice constants and total energies for undoped and Ac doped β -FeSi₂ after geometry optimization

Sample	a / nm	b / nm	c / nm	V / nm ³	Total energy / eV
Undoped β -FeSi ₂ (experimental)	0.9863	0.7791	0.7833	0.6019	—
Undoped β -FeSi ₂ (calculated)	0.9905	0.7737	0.7791	0.5971	-17302.1698
Ac doped β -FeSi ₂ (Fe I site)	0.9778	0.7881	0.7947	0.6124	-16472.5479
Ac doped β -FeSi ₂ (Fe II site)	1.0170	0.7754	0.7801	0.6150	-16473.5169

由表 1 还可以看出, 当选用 Ac 置换 β -FeSi₂ 中的 FeI 位和 FeII 位时, 单胞的总能量是不同的, 能量差为 0.9690 eV。可见, 当 Ac 置换 FeII 位的原子时, 单胞 β -FeSi₂ 的能量更低, 对应着更加稳定的结构。因此, Ac 倾向于置换 β -FeSi₂ 中的 FeII 位。



数 a, b 及 c 都有所变化。这是由于 Ac 的原子半径 (0.195 nm) 大于 Fe 的原子半径 (0.126 nm), 所以杂质 Ac 的掺入, 导致晶胞体积增大、晶格结构发生了畸变。

下面的能量及光学性质的计算是选用 Ac 置换 β -FeSi₂ 中的 FeII 位进行的。

3.2 电子结构

图 2 是 Ac 掺杂前后 β -FeSi₂ 费米面附近的能带结构。

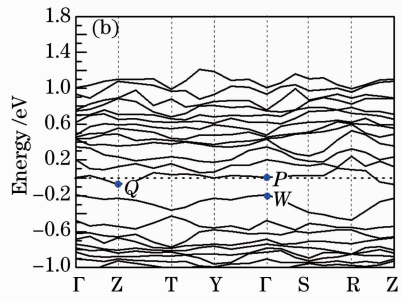


图 2 β -FeSi₂ 费米面附近的能带结构。(a) 未掺杂; (b) Ac 掺杂

Fig. 2 Band structure of β -FeSi₂ near the gap. (a) Undoped; (b) Ac doped

由图 2(a) 可知: β -FeSi₂ 是准直接带隙半导体, 直接带隙为 0.75 eV (由价带顶的 M 点 \rightarrow 导带底的 N 点), 间接带隙为 0.72 eV (由价带顶的 M 点 \rightarrow 导带底的 U 点)。由图 2(b) 可知: Ac 掺杂后, 能带数量明显增多, 导带底和价带顶均变得平缓, 费米能级穿过了导带, 导带和价带均向下偏移, 且导带向下偏移的幅度明显大于价带, 导致带隙宽度变窄。Ac 掺

杂后 β -FeSi₂ 仍是准直接带隙半导体, 直接带隙为 0.19 eV (由价带顶的 W 点 \rightarrow 导带底的 P 点), 间接带隙为 0.12 eV (由价带顶的 W 点 \rightarrow 导带底的 Q 点)。由图 2(b) 还可以看出: Ac 掺杂后价带变得稀疏, 这是由于 Ac 原子的 7s 态与周围原子有较强的相互作用, 其态密度变化较为平缓, 显示出很强的非定域性。这也可以由下面的分波态密度来做进一步

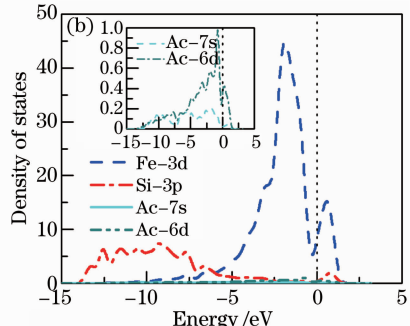
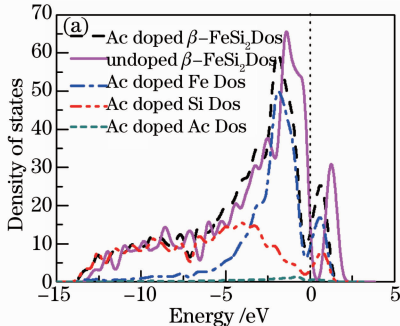


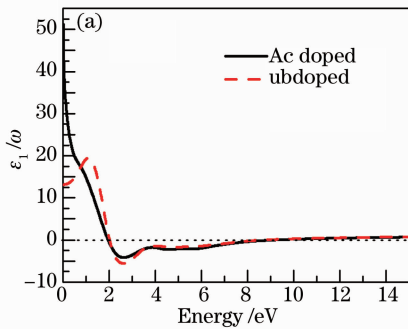
图 3 Ac 掺杂前后 β -FeSi₂ 的 (a) 总电子态密度和 (b) 各原子的分波态密度

Fig. 3 (a) Total density of state and (b) partial density of states for each atom in undoped and Ac doped β -FeSi₂

的解释。

图 3 是 Ac 掺杂 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的总电子态密度 (DOS) 及各原子的分波态密度 (PDOS)。 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的总电子态密度及 Fe、Si 原子的分波态密度在文献 [3] 中已经被研究了; 费米能级附近的态密度主要由 Fe 的 3d 态电子和 Si 的 3p 态电子贡献。

由图 3(a) 可以看出: 掺 Ac 的 $\beta\text{-FeSi}_2$ 总电子态密度发生了变化: 在 -1.39 eV 和 1.25 eV 两处的电子态密度峰值分别向低能方向移动且减弱, 费米能级进入导带, 总电子态密度主要由 Fe 和 Si 两种原子的分波态密度构成, Ac 的贡献很小。由图 3(b) 可以看出: 在费米能级附近, 总电子态密度由 Fe 的 3d 轨道电子态密度和 Si 的 3p 轨道电子态密度构成, 而 Ac 的 6d 轨道电子态密度贡献很小; Ac 的



7s 轨道电子态密度在价带区变化较为平缓并且贡献较小, 而在导带区的贡献非常小, 可以忽略不计。

3.3 光学性质

光的复介电函数 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 可以用来描述线性响应范围内的固体宏观光学响应函数, 再根据直接跃迁几率的定义和克拉默斯-克勒尼希色散关系可以推导出晶体介电函数虚部、实部、吸收率和反射率等, 具体的推导过程见文献 [18-19]。这些参数是分析晶体能带结构和光学性质的理论基础, 反映了能级间电子跃迁产生光谱的发光机理。

3.3.1 复介电函数

图 4 是 Ac 掺杂前后 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的介电函数实部和虚部。

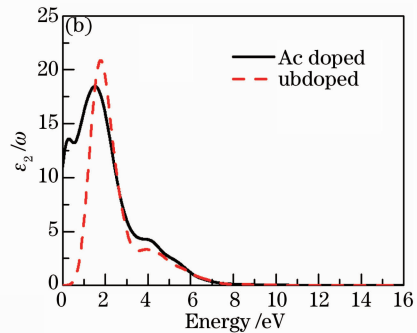


图 4 Ac 掺杂前后 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的介电函数。(a) 实部; (b) 虚部

Fig. 4 Dielectric function of undoped and Ac doped $\beta\text{-FeSi}_2$. (a) $\epsilon_1(\omega)$; (b) $\epsilon_2(\omega)$

由图 4(a) 可知: Ac 掺杂后, $\beta\text{-FeSi}_2$ 的静态介电常数 $\epsilon_1(0)$ 由 12.83 提高到 51.20, $\epsilon_1(\omega)$ 随着光子能量的增加迅速减小。由图 4(b) 可知: Ac 掺杂后, $\beta\text{-FeSi}_2$ 的介电函数的虚部 ϵ_2 在 1.77 eV 的峰值 20.87 向低能方向移动了 0.27 eV, 并且峰值减小到 18.46; 在能量大于 10 eV 的区域, ϵ_2 逐渐趋于零。这些现象可以由图 3 的态密度来解释。由图 3 可知, Ac 的 6d 态电子态密度在费米面处存在较大的峰值, 因此, 杂质原子 Ac 的掺入, 在费米面处提供了大量的导电电子, 改变了电子在带间的跃迁, 对 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的介电函数及其他光学性质造成了影响。

3.3.2 复折射率

根据计算得出的复介电函数可求出复折射率。图 5 为 Ac 掺杂前后 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的折射率 n 和消光系数 k 。由图 5 可知: Ac 掺杂前, $\beta\text{-FeSi}_2$ 的折射率 $n_0 = 3.62$, 与 Filonov 等 [20] 的结果符合较好, 在能量为 1.20 eV 附近, 折射率 n 有一个峰值为 4.54; 在能量为 2.16 eV 附近, 消光系数 k 有一峰值为 3.13, 在能量大于 10 eV 时, 消光系数 k 趋于零。Ac 掺杂

后, $\beta\text{-FeSi}_2$ 的折射率 n_0 提高到 7.20, 在能量小于 7.70 eV 的区域, 折射率 n 随着光子能量的增加迅速减小到零, 在能量大于 7.70 eV 的区域, 折射率 n 随着光子能量的增加缓慢增加; 消光系数 k 向低能方向有一微小的偏移, 最大峰值降低为 2.89, 最大峰值处对应的光子能量为 2.12 eV, 在能量大于 10 eV 时, 消光系数 k 趋于零。

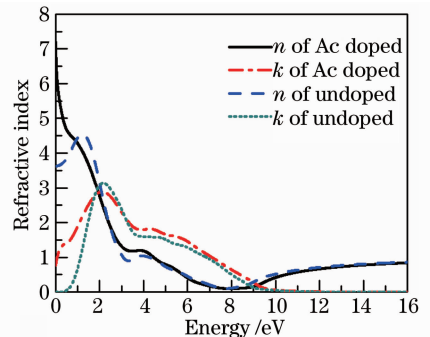
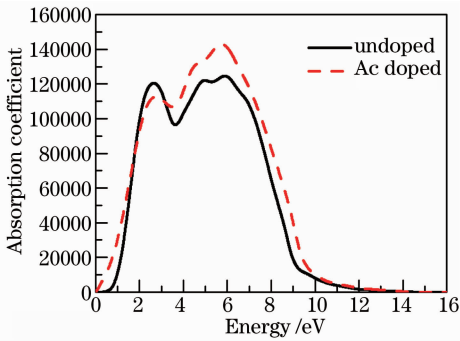


图 5 Ac 掺杂前后 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的折射率和消光系数
Fig. 5 Refractive index and extinction coefficient of undoped and Ac doped $\beta\text{-FeSi}_2$

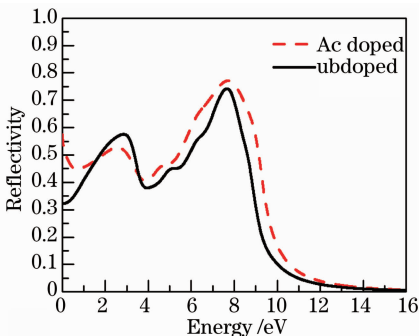
图 6 Ac 掺杂前后 β -FeSi₂ 的吸收系数Fig. 6 Absorption coefficient of undoped and Ac doped β -FeSi₂

3.3.3 吸收系数

根据计算得出的复介电函数还可求出吸收系数,计算结果如图 6 所示。由图 6 可知:Ac 掺杂前, β -FeSi₂ 的吸收系数有三个峰,分别位于 2.65、4.98、5.89 eV 附近;在能量大于 15.89 eV 时,吸收系数为零。Ac 掺杂后, β -FeSi₂ 的吸收系数只有两个峰,位于 2.73 eV 附近的峰值减弱,这个峰是由 Fe 的 3d 态电子和 Ac 的 6d 态电子跃迁到导带底所形成的;位于 5.77 eV 处的峰值增强,这个峰是由 Fe 的 3d 态电子和 Ac 的 6d 态电子的混合态与 Si 的 3p 态电子杂化后到导带跃迁形成的;在能量大于 15.61 eV 时,吸收系数为零。

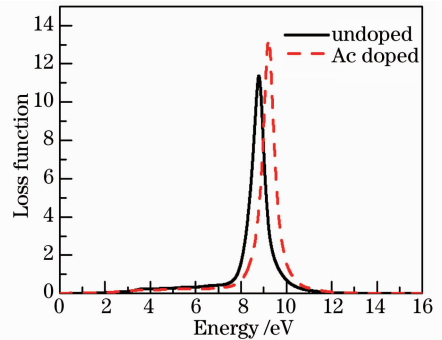
3.3.4 反射谱

图 7 为 Ac 掺杂前后 β -FeSi₂ 的反射谱。由图 7 可知:Ac 掺杂前,在能量 7~8eV 的区域, β -FeSi₂ 的反射率达 70%,这是由于在这一能量范围内 β -FeSi₂ 呈现出金属反射特性,入射的光大部分被反射了,对应折射率的值趋于零。Ac 掺杂后, β -FeSi₂ 的反射率达 70% 的能量范围扩展到 6.8~8.4 eV 的区域,并且在 7.70 eV 处,反射率达到最大值(前面计算的折射率趋于零相对应),但增大的幅度不明显。

图 7 Ac 掺杂前后 β -FeSi₂ 的反射谱Fig. 7 Reflectivity of undoped and Ac doped β -FeSi₂

3.3.5 能量损失函数

能量损失函数是描述电子在通过均匀的电介质时能量损失情况的物理量,其峰值代表与等离子体振荡相关联的特性。图 8 反映了 Ac 掺杂前后 β -FeSi₂ 的能量损失函数的变化。由图 8 可知:Ac 掺杂后 β -FeSi₂ 的能量损失函数的峰值向高能方向移动了 0.43 eV,且大于未掺杂时 β -FeSi₂ 的能量损失函数的峰值。

图 8 Ac 掺杂前后 β -FeSi₂ 的能量损失函数Fig. 8 Loss function of undoped and Ac doped β -FeSi₂

4 结 论

基于第一性原理的密度泛函理论赝势平面波方法对 Ac 掺杂前后 β -FeSi₂ 的几何结构、电子结构和光学性质进行了理论计算和分析。几何结构的计算结果表明:Ac 掺杂后 β -FeSi₂ 晶格常数 a 、 b 及 c 都有所变化,晶胞体积增大。电子结构的计算结果表明:掺入 Ac 后 β -FeSi₂ 费米面附近的能带结构变得复杂,Ac 置换 Fe 导致费米面进入导带,能带结构仍为准直接带隙,但是带隙明显变窄;在费米面附近,Ac 原子的 6d 层电子态密度只占总电子态密度很小的一部分,而总电子态密度仍然由 Fe 的 3d 层和 Si 的 3p 层电子态密度决定。光学性质的计算结果表明:静态介电常数明显提高,介电函数的虚部 ϵ_2 的峰值向低能方向移动并且减弱,折射率 n_0 明显提高,消光系数 k 向低能方向有一微小的偏移,位于 5.77 eV 处的吸收峰增强,平均反射效应变化不大,这说明 Ac 掺杂 β -FeSi₂ 能有效增强其对光的吸收和折射作用,这将有助于提高 β -FeSi₂ 的光电转换效率。

致谢 感谢贵州大学计算平台提供的计算支持。

参 考 文 献

- 1 Pan Zhijun, Zhang Lanting, Wu Jiansheng. A first-principle study of electronic and geometrical structures of semiconducting β -

- FeSi₂ with doping [J]. *Acta Physica Sinica*, 2005, 54(11): 5308–5313.
- 潘志军, 张澜庭, 吴建生. 掺杂半导体 β -FeSi₂ 电子结构及几何结构第一性原理研究[J]. *物理学报*, 2005, 54(11): 5308–5313.
- 2 N E Christensen. Electronic structure of β -FeSi₂[J]. *Phys Rev B*, 1990, 42(11): 7148–7153.
- 3 Yan Wanjun, Xie Quan, Zhang Jinmin. Interband optical transitions in semiconducting iron disilicide β -FeSi₂[J]. *Chin J Semicond*, 2007, 28(9): 1381–1387.
- 闫万珺, 谢 泉, 张晋敏. 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.
- 4 Li Weiwen, Zhao Xinbing, Zhou Bangchang, *et al.*. Electrical property research on N-doped β -FeSi₂ based alloys [J]. *Nonferrous Metals*, 2002, 54(3): 9–11.
- 李伟文, 赵新兵, 周邦昌, 等. 掺 N 的 β -FeSi₂ 基热电材料电学性能的研究[J]. *有色金属*, 2002, 54(3): 9–11.
- 5 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.
- 6 Yan Wanjun, Xie Quan. First principle calculation of the electronic structure and optical properties of impurity-doped β -FeSi₂ semiconductors [J]. *Chin J Semicond*, 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 Zhang Chunhong, Yan Wanjun, Zhou Shiyun, *et al.*. The study of electronic structure and optical properties for C-doped β -FeSi₂[J]. *J At Mol Phys*, 2013, 30(4): 683–688.
- 张春红, 闫万珺, 周士芸, 等. C 掺杂 β -FeSi₂ 的电子结构和光学特性研究[J]. *原子与分子物理学报*, 2013, 30(4): 683–688.
- 8 Zhang Zhongzheng, Zhang Chunhong, Yan Wanjun, *et al.*. First principle study on geometric structure and electronic structure of β -FeSi₂ doped rare earth element La [J]. *J At Mol Phys*, 2014, 31(2): 338–342.
- 张忠政, 张春红, 闫万珺, 等. 稀土元素 La 掺杂 β -FeSi₂ 的几何结构和电子结构的的第一性原理研究[J]. *原子与分子物理学报*, 2014, 31(2): 338–342.
- 9 Yan Wanjun, Zhou Shiyun, Xie Quan, *et al.*. Effect of Al doping concentration 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 电子结构及光学性质的影响[J]. *光学学报*, 2012, 32(5): 0516003.
- 10 Yan Wanjun, Zhang Chunhong, Gui Fang, *et al.*. Electronic structure and optical properties of stressed β -FeSi₂[J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(7): 0716001.
- 闫万珺, 张春红, 桂 放, 等. 应力调制下 β -FeSi₂ 电子结构及光学性质[J]. *光学学报*, 2013, 33(7): 0716001.
- 11 Yan Wanjun, Zhang Zhongzheng, Guo Xiaotian, *et al.*. First principle calculation on the photoelectric properties of V-Al co-doped CrSi₂[J]. *Acta Optica Sinica*, 2014, 34(4): 0416002.
- 闫万珺, 张忠政, 郭笑天, 等. 第一性原理计算 V-Al 共掺杂 CrSi₂ 的光电特性[J]. *光学学报*, 2014, 34(4): 0416002.
- 12 Y Dusausoy, J Protas, R Wandji, *et al.*. Structure crystalline du disiliciure de fer, FeSi₂[J]. *Acta Crystallogr Sec B*, 1971, 27(6): 1209–1218.
- 13 M D Segall, J D Lindan Philip, M J Probert, *et al.*. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code [J]. *J Phys: Condens Matter*, 2002, 14(11): 2717–2744.
- 14 David Vanderbilt. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism [J]. *Phys Rev B*, 1990, 41(11): 7892–7895.
- 15 J P Perdew, K Burke, M Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Phys Rev Lett*, 1996, 77(18): 3865–3868.
- 16 H J Monkhorst, J D Pack. Special points for Brillouin-zone integrations [J]. *Phys Rev B*, 1976, 13(12): 5188–5192.
- 17 T H Fischer, J Almlof. General methods for geometry and wavefunction optimization [J]. *J Phys Chem*, 1992, 96(24): 9768–9774.
- 18 Shen Xuechu. *Semiconductor Spectra and Optical Properties* [M]. Beijing: Science Press (The Second Edition), 1992. 76–94.
- 沈学础. *半导体光谱和光学性质* [M]. 北京: 科学出版社(第二版), 1992. 76–94.
- 19 Fang Rongchuan. *Solid-States Spectroscopy* [M]. Hefei: China Science and Technology Press, 2001. 71–75.
- 方容川. *固体光谱学* [M]. 合肥: 中国科学技术出版社, 2001. 71–75.
- 20 A B Filonov, D B Migas, V L Shaposhnikov, *et al.*. Theoretical and experimental study of interband optical transitions in semiconducting iron disilicide [J]. *J Appl Phys*, 1998, 83(8): 4410.

栏目编辑: 韩 峰