

稀土(Y、Ce)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} 邓永荣^{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 基于第一性原理赝势平面波方法,对稀土(Y、Ce)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,Y或Ce掺杂后 β -FeSi₂的晶格常数改变,晶胞体积减小。电子结构的计算表明,掺入稀土后 β -FeSi₂费米面附近的能带结构变得复杂,带隙变窄;总电子态密度发生了变化,Y的4d轨道电子态密度和Ce的4f轨道电子态密度主要贡献给费米面附近。光学性质的计算结果表明,Y或Ce掺杂后 β -FeSi₂的静态介电常数明显提高,介电函数虚部 ϵ_2 的峰值均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 的峰值减弱,计算结果为 β -FeSi₂材料掺杂稀土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; O881.1

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201535.0116001

First Principle Study on Electronic Structure and Optical Properties of β -FeSi₂ with Doping Rare Earth (Y、Ce)

Zhang Chunhong^{1,3} Zhang Zhongzheng^{2,3} Deng Yongrong^{2,3} Yan Wanjun^{2,3}

Zhou Shiyun^{2,3} Gui Fang^{2,3} Guo Benhua^{2,3}

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

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

³Engineering Center of Avionics Electrical and Information Network, Anshun University, Anshun, Guizhou 561000, China

Abstract By using the first principle pseudo-potential plane-wave method, the geometrical structure, electronic structure and optical properties of β -FeSi₂ with doping rare earth (Y、Ce) are calculated and analyzed. The calculated results of the geometrical structure show that the lattice constants change, the volume of lattice reduces. Electronic structure calculation indicates that band structure near the gap becomes complex, and bandgap becomes narrow obviously. The total density of state changes, and the density of states for Y-4d and Ce-4f are mainly contributing to the Fermi energy level. Optical properties calculation indicates that the static dielectric constant 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 the peak of k decreases. These results offer theoretical data for experimental study β -FeSi₂ doped with rare earth modification.

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

OCIS codes 160.4670; 160.4760; 160.6990; 160.6000

收稿日期: 2014-08-01; 收到修改稿日期: 2014-09-03

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金 [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市州地普通本科高校教育质量提升项目[黔高教发KY(2011)278号]、贵州省高等学校航空电子电气与信息网络工程中心

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

1 引 言

铁硅化合物 β -FeSi₂是一种新型的环境友好型半导体光电材料,具有0.70~0.90 eV^[1-3]的准直接带隙,对于红外波长有较高的吸收率,理论上光电转换效率可达16%~23%。因此这种材料被视为制造太阳能电池和近红外线探测器的理想材料。

掺杂可以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的科学指导意义。稀土金属由于具有独特的最外层电子结构,因而表现出独特的物理和化学性质。稀土元素掺杂后可以改变材料的能带结构和光学性质,因此,稀土成为近年来掺杂体系研究的重点。宋国利^[4]利用溶胶-凝胶法分析了ZnO:Tb³⁺纳米晶发射机制及稀土离子掺杂浓度和退火温度对其发光性质的影响,证实稀土Tb³⁺与纳米ZnO基质之间存在双向能量传递。丁迎春等^[5]采用第一性原理对掺稀土元素(Y,La)的 γ -Si₃N₄的电子结构和光学性质进行了计算,发现稀土(Y,La)掺杂后的 γ -Si₃N₄带隙减小,静态介电常数显著提高。吴莉莉等^[6]用共沉淀法制备了稀土Ce掺杂的ZnO纳米晶,结果表明当Ce掺杂摩尔分数为1%时,在443 nm段出现半峰全宽较窄的蓝光发射带,这对制作蓝光短波器件具有重要意义。刘永刚等^[7]利用第一性原理计算了稀土掺杂金红石相TiO₂的电子结构,结果表明稀土掺杂后能够改变其带隙。吴玉喜等^[8]利用第一性原理研究了稀土(Y,La)掺杂ZnO的电子结构和光学性质,发现掺杂后ZnO的带隙展宽,光学性质发生变化。鉴于此,作者在初步完成稀土La掺杂 β -FeSi₂几何结构和电子结构研究的基础上^[9],有必要对其他稀土元素掺杂 β -FeSi₂光电性质作深入的研究。为此,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^[10-13],对掺入稀土元素钇(Y)或铈(Ce)的 β -FeSi₂的电子结构及其光学性质进行理论研究,并从理论上分析Y或Ce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 β -FeSi₂掺杂稀土改性的实验研究提供理论依据。

2 计算模型与方法

计算模型 β -FeSi₂属正交晶系,空间群为Cmca,晶格常数为 $a=0.9863$ nm, $b=0.7791$ nm, $c=0.7833$ nm^[14],每个单胞内有48个原子,含4种非同原子^[1]。其中Fe I位及Fe II位原子有16个,Si I位及Si II位原子有32个。计算时选用一个RE(Y或Ce)原子取代Fe I位或Fe II位的一个Fe原子作为掺杂模型,如图1所示。

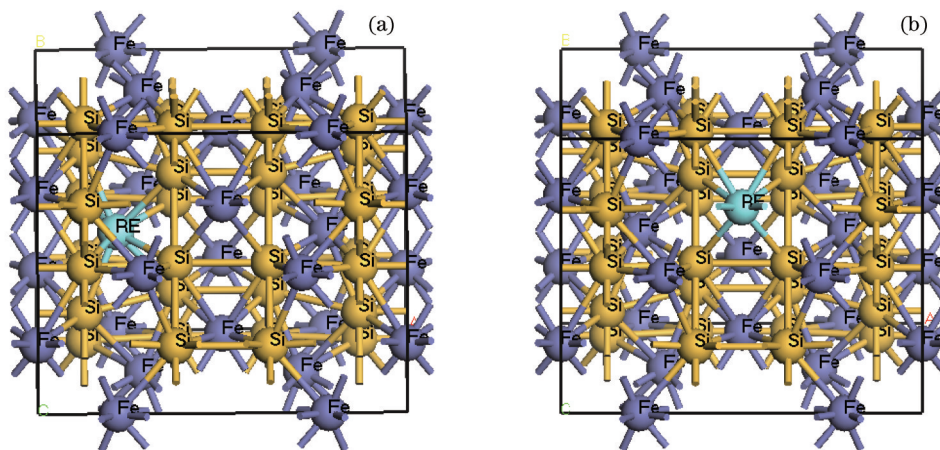


图1 稀土(Y或Ce)掺杂 β -FeSi₂的(a) Fe I和(b) Fe II位计算模型

Fig.1 Rare earth (Y or Ce) doped β -FeSi₂. (a) Site of Fe I; (b) site of Fe II

本文采用的计算方法是第一性原理赝势平面波方法,主要计算工作由CASTEP软件包^[15]完成。计算中采用超软赝势^[16]来处理离子实与电子间的相互作用,选取局域密度近似(LDA)来处理交换关联能部分,采用Ceperley-Alder^[17]和Perdew-Zunger^[18]给出的公式来处理交换关联势。计算选取了Fe的3d⁴4s²、Si的3s²3p²,Y的4s²4p⁶4d¹5s²,Ce的4f¹5s²5p⁶5d¹6s²为价电子,设定平面波的截断能为330 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^[19]的对称特殊k点方法,单胞总能量收敛于2 \times 10⁻⁶ eV/atom。

3 计算结果与讨论

3.1 几何结构

表 1 是用 BFG 算法^[20]优化后得到的 Y 或 Ce 掺杂前后 β -FeSi₂ 晶格常数及总能量。由表 1 可以看出:用一个 Y 或 Ce 原子置换一个 Fe I 位原子后, β -FeSi₂ 的晶格常数 a 、 b 及 c 都有所减少; 一个 Y 原子置换一个 Fe II 位原子后, β -FeSi₂ 的晶格常数 b 及 c 有所减少, a 有所增大; 一个 Ce 原子置换一个 Fe II 位原子后, β -FeSi₂ 的晶格常数 a 及 c 有所减少, b 有所增大。总的来看, 1 个 Y 或 Ce 原子置换一个 Fe 原子后, 晶胞体积均减少。这表明, 稀土元素 Y 或 Ce 引入后, 具有细化晶粒的作用。

表 1 β -FeSi₂ 及稀土掺杂后的优化晶格常数及总能量

Table 1 Lattice constants and total energies for undoped and rare earth 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
Y doped β -FeSi ₂ (Fe I site)	0.9859	0.7696	0.7671	0.5817	-17444.4125
Y doped β -FeSi ₂ (Fe II site)	0.9915	0.76254	0.7650	0.5782	-17445.7337
Ce doped β -FeSi ₂ (Fe I site)	0.9898	0.7664	0.7711	0.5849	-17457.2592
Ce doped β -FeSi ₂ (Fe II site)	0.9601	0.7764	0.7697	0.5737	-17459.5767

由表 1 还可以看出, 当选用 Y 或 Ce 置换 β -FeSi₂ 中的 Fe I 位和 Fe II 位时, 单胞的总能量是不同的, 能量差分别为 1.3212 和 2.3175 eV。可见, 当用 Y 或 Ce 置换 Fe II 位的原子时, β -FeSi₂ 体系的能量更低, 对应着更加稳定的结构。因此, 稀土 Y 或 Ce 倾向于置换 β -FeSi₂ 中的 Fe II 位。下面的电子结构及光学性质的计算均是选用稀土 Y 或 Ce 置换 β -FeSi₂ 中的 Fe II 位进行的。

3.2 电子结构

图 2 是稀土 Y 或 Ce 掺杂前后 β -FeSi₂ 费米面附近的能带结构。

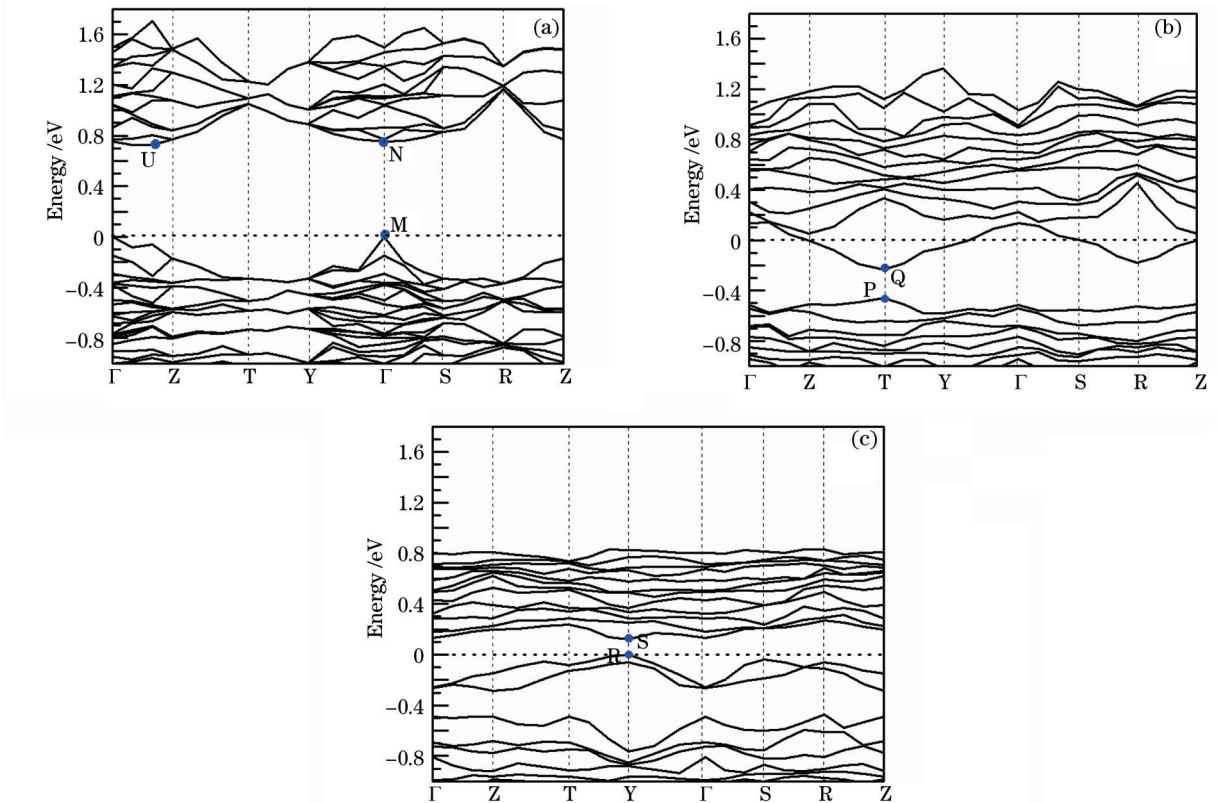


图 2 β -FeSi₂ 费米面附近的能带结构。(a)未掺杂;(b) Y 掺杂;(c) Ce 掺杂

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

由图 2(a)可知, β -FeSi₂是准直接带隙半导体,直接带隙 0.75 eV 是由价带顶的 M 点→导带底的 N 点,间接带隙 0.72 eV 是由价带顶的 M 点→导带底的 U 点。

由图 2(b)可知, Y 掺杂后, β -FeSi₂能带数量明显增多,价带顶变得平缓,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。Y 掺杂后 β -FeSi₂是直接带隙半导体,直接带隙为 0.23 eV,是由价带顶的 P 点→导带底的 Q 点,导电类型变为 n 型。

由图 2(c)可以看出, Ce 掺杂后, β -FeSi₂能带数量也明显增多,价带和导带均变得平缓,导带向下偏移,导致带隙宽度变窄。Ce 掺杂后 β -FeSi₂是直接带隙半导体,直接带隙为 0.12 eV,是由价带顶的 R 点→导带底的 S 点,导电类型仍为 p 型。

由图 2(b) 和 (c)可知, 掺杂稀土 Y 或 Ce 后, 均出现了部分能带变得稀疏和平缓现象,这是由于 Y 原子的 5s 态和 Ce 原子的 6s 态分别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。这也可以由下面的部分态密度来做进一步的解释。

图 3 是稀土掺杂 β -FeSi₂的总电子态密度(DOS)及 Y 和 Ce 原子的部分态密度(PDOS)。

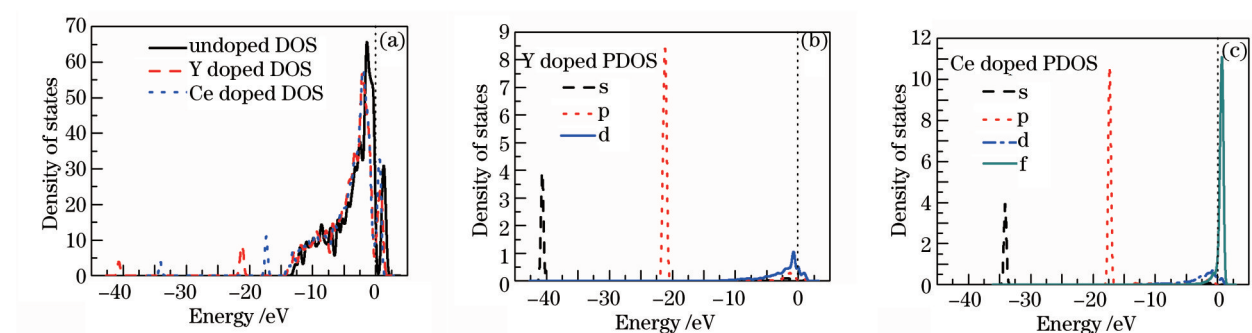


图 3 稀土掺杂 β -FeSi₂的电子态密度。(a)总电子态密度;(b) Y 原子的部分态密度;(c) Ce 原子的部分态密度

Fig.3 Density of state for undoped and rare earth doped β -FeSi₂. (a) Total density of state; (b) partial density of states for Y atom; (c) partial density of states for Ce atom

由图 3(a)可以看出, 掺稀土 Y 或 Ce 后, β -FeSi₂总电子态密度发生了变化。在 1.25 eV 处的电子态密度峰值向低能方向移动,在掺 Y 后,减弱了 6.87;而在掺 Ce 后,增加了 2.03;在 -1.39 eV 处的电子态密度峰值向低能方向移动且均减弱。掺 Y 或 Ce 后,分别引入了两个新的价带。如掺 Y 后,在 -40.68 eV 和 -21.16 eV 附近的两个新价带分别由 Y 的 4s 和 4p 轨道电子态密度提供,这可由图 3(b)看出。由图 3(b)还可以看出, Y 的 5s 轨道电子态密度只对价带顶附近的价带部分有较小的贡献,并且变化较为平缓。Y 的 4d 和 4p 轨道电子态密度主要贡献给了费米能级附近的价带和导带,但 4d 轨道电子态密度贡献较大。掺 Ce 后,在 -34.11 eV 和 -17.33 eV 附近的两个新价带分别由 Ce 的 5s 和 5p 轨道电子态密度提供,这可由图 3(c)看出。由图 3(c)还可以看出, Ce 的 6s 轨道电子态密度对价带顶附近的价带和导带部分有较小的贡献,并且变化也较为平缓。Ce 的 4f 和 5d 轨道电子态密度主要贡献给了费米能级附近的价带和导带,但 4f 轨道电子态密度贡献较大。

3.3 光学性质

线性响应范围内的固体宏观光学响应函数 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 能够描述光的复介电函数,然后根据直接跃迁几率的定义和克拉默斯-克勒尼希色散关系便可以推导出晶体介电函数虚部、实部、吸收率、折射率和反射率等,具体的推导过程见文献[21-22]。以上参数是分析晶体能带结构和光学性质的主要理论基础,反映出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 是稀土 Y 或 Ce 掺杂前后 β -FeSi₂的介电函数实部 $\epsilon_1(\omega)$ 和虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 。由图 4(a)可知,稀土 Y 或 Ce 掺杂后, β -FeSi₂的静态介电常数 $\epsilon_1(0)$ 由 12.83 提高到 24.87 和 31.35。在能量为 0~2.54 eV 区域, $\epsilon_1(\omega)$ 随着光子能量的增加迅速减小;在 2.54~40 eV 区域, $\epsilon_1(\omega)$ 随着光子能量的增加缓慢增加趋于零。由图 4(b)可知,稀土 Y 或 Ce 掺杂后, β -FeSi₂的介电函数的虚部 ϵ_2 在 1.77 eV 的峰值 20.87 均向低能方向有个非常微小的移动,峰值分别减小为 17.85 和 14.57。在能量大于 7.50 eV 的区域, ϵ_2 逐渐趋于零。以上这些现象可以由图 3 的电子

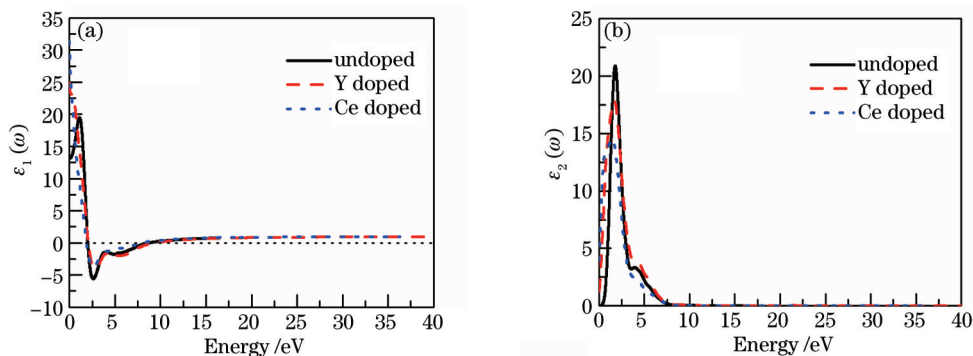


图4 稀土掺杂前后 β -FeSi₂的介电函数。(a)实部;(b)虚部

Fig.4 Dielectric function of undoped and rare earth doped β -FeSi₂. (a) $\epsilon_1(\omega)$; (b) $\epsilon_2(\omega)$

态密度来解释。由图3可知,Y的4d态和Ce的4f态电子态密度在费米面处存在较大的峰值。因此,稀土原子Y或Ce的掺入,均在费米面处提供了大量的导电电子,从而改变了电子在带间的跃迁,对 β -FeSi₂的介电函数及其他光学性质造成了影响。

3.3.2 吸收系数

根据复介电函数可求出吸收系数,计算结果如图5所示。由图5可知:稀土Y或Ce掺杂后,光学吸收边均向低能方向移动,出现了红移现象。Y掺杂后, β -FeSi₂的吸收系数在5.98 eV处明显增强,并且在21.55 eV处增加了一个新的吸收峰,这是由Y原子的4p⁶电子跃迁到导带底形成的。Ce掺杂后, β -FeSi₂的吸收系数在0~15 eV区域的峰值明显降低,并且在17.99 eV处增加了一个新的吸收峰,这是由Ce原子的5p⁶电子跃迁到导带底形成的。

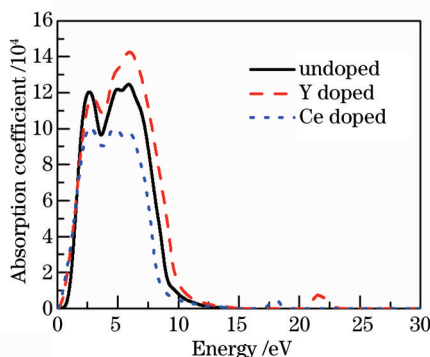


图5 稀土掺杂前后 β -FeSi₂的吸收系数

Fig.5 Absorption coefficient of undoped and rare earth doped β -FeSi₂

3.3.3 复折射率

根据复介电函数还可求出复折射率。图6为稀土Y或Ce掺杂前后 β -FeSi₂的折射率 n 和消光系数 k 。由图6(a)可知,稀土Y或Ce掺杂后, β -FeSi₂的折射率 $n_0=3.62$ 分别提高到4.99和5.61。在能量分别小于7.88 eV和7.48 eV的区域,折射率 n 随着光子能量的增加迅速减小到零;在能量分别大于7.88 eV和7.48 eV的区域,折射率 n 随着光子能量缓慢增加趋于平稳。由图6(b)可知,稀土Y或Ce掺杂后, β -FeSi₂的消光系数 k 在2.16 eV处的峰值3.13降低为2.84和2.58,在能量大于10.50 eV时,消光系数 k 趋于零。

3.3.4 反射谱

图7为稀土Y或Ce掺杂前后 β -FeSi₂的反射谱。由图7可知,稀土Y或Ce掺杂后, β -FeSi₂的反射谱发生了变化。掺Y后, β -FeSi₂的反射率达70%的能量范围由7~8 eV扩展到6.9~8.6 eV的区域,说明在这一能量范围内 β -FeSi₂呈现出金属反射特性,入射的光大部分被反射了。掺Ce后,平均反射率明显降低。

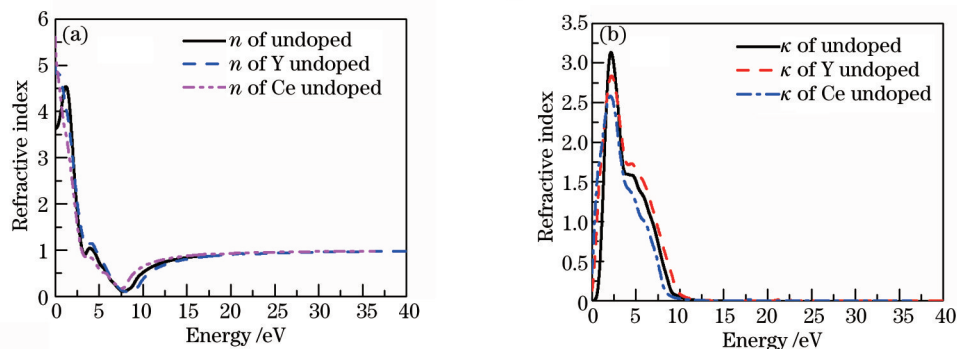


图6 稀土掺杂前后 β -FeSi₂的复折射率。(a)折射率;(b)消光系数
Fig.6 Refractive index of undoped and rare earth doped β -FeSi₂. (a) n ; (b) k

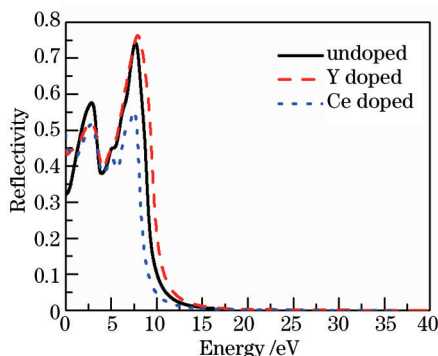


图7 稀土掺杂前后 β -FeSi₂的反射谱
Fig.7 Reflectivity of undoped and rare earth doped β -FeSi₂

4 结 论

基于第一性原理的赝势平面波方法对稀土(Y、Ce)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,Y或Ce掺杂后 β -FeSi₂晶格常数 a 、 b 及 c 都有所变化,晶胞体积减小,Y或Ce倾向于置换 β -FeSi₂中的Fe II位。电子结构的计算结果表明,掺入稀土后 β -FeSi₂费米面附近的能带结构变得复杂,成为直接带隙半导体,带隙变窄,Y的4d轨道电子态密度和Ce的4f轨道电子态密度主要贡献给费米面附近。光学性质的计算结果表明,稀土掺杂后静态介电常数均明显提高,介电函数的虚部 ϵ_2 的峰值均向低能方向移动并且减弱,折射率 n_0 明显提高,这些为研发新的介电材料和折射材料提供了理论依据。

致谢:感谢贵州大学云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]. Chinese 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 Song Guoli. Luminescence characteristics of Terbium-doped nanocrystalline zinc oxide [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007, 27(12): 2409-2414.
宋国利. 稀土 Tb³⁺掺杂纳米 ZnO 的发光性质[J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 27(12): 2409-2414.

- 5 Ding Yingchun, Xiang Anping, Xu Ming, *et al.*. Electrical structures and optical properties of doped earth element (Y, La) in γ - Si_3N_4 [J]. *Acta Physica Sinica*, 2007, 56(10): 5996-6002.
丁迎春, 向安平, 徐明, 等. 掺稀土元素(Y, La)的 γ - Si_3N_4 的电子结构和光学性质[J]. *物理学报*, 2007, 56(10): 5996-6002.
- 6 Wu Lili, Wu Youshi, Zou Ke, *et al.*. Photoluminescent properties of La and Ce doped ZnO nanocrystals [J]. *Chinese J Luminescence*, 2008, 29(3): 523-526.
吴莉莉, 吴佑实, 邹科, 等. La、Ce掺杂ZnO纳米晶的发光特性[J]. *发光学报*, 2008, 29(3): 523-526.
- 7 Liu Yonggang, Song Mianxin, Bian Liang, *et al.*. *Ab initio* band gap calculation of rare earth doped rutile TiO_2 [J]. *J At Mol Phys*, 2008, 25(5): 1141-1145.
刘永刚, 宋绵新, 边亮, 等. 稀土掺杂金红石相 TiO_2 的第一性原理的定性计算[J]. *原子与分子物理学报*, 2008, 25(5): 1141-1145.
- 8 Wu Yuxi, Hu Zhixiang, Gu Shulin, *et al.*. Electrical structure and optical properties of earth element (Y,La) doped in ZnO [J]. *Acta Physica Sinica*, 2011, 60(1): 017101.
吴玉喜, 胡智向, 顾书林, 等. 稀土元素(Y, La)掺杂ZnO的电子结构和光学性质[J]. *物理学报*, 2011, 60(1): 017101.
- 9 Zhang Zhongzheng, Zhang Chunhong, Yan Wanjun, *et al.*. First principle study on geometric structure and electronic structure of β - FeSi_2 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 - FeSi_2 的几何结构和电子结构的第一性原理研究[J]. *原子与分子物理学报*, 2014, 31(2): 338-342
- 10 Yan Wanjun, Zhou Shiyun, Xie Quan, *et al.*. First principles study of electronic structure and optical properties for co-doped β - FeSi_2 [J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, 31(6): 0616003.
闫万珺, 周士芸, 谢泉, 等. Co掺杂 β - FeSi_2 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 Yan Wanjun, Zhou Shiyun, Xie Quan, *et al.*. Effect of Al doping concentration on electronic and optical properties of CrSi_2 [J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(5): 0516003.
闫万珺, 周士芸, 谢泉, 等. Al掺杂浓度对 CrSi_2 电子结构及光学性质的影响[J]. *光学学报*, 2012, 32(5): 0516003.
- 12 Yan Wanjun, Zhang Chunhong, Gui Fang, *et al.*. Electronic structure and optical properties of stressed β - FeSi_2 [J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(7): 0716001.
闫万珺, 张春红, 桂放, 等. 应力调制下 β - FeSi_2 电子结构及光学性质[J]. *光学学报*, 2013, 33(7): 0716001.
- 13 Yan Wanjun, Zhang Zhongzheng, Guo Xiaotian, *et al.*. First principle calculation on the photoelectric properties of V-Al co-doped CrSi_2 [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 CrSi_2 的光电特性[J]. *光学学报*, 2014, 34(4): 0416002.
- 14 Y Dusausoy, J Protas, R Wandji, *et al.*. Structure cristalline du disiliciure de fer, FeSi_2 - β [J]. *Acta Crystallogr Sec B*, 1971, 27(6): 1209-1218.
- 15 M D Segall, P J D Lindan, M J Probert, *et al.*. First-principles simulation: Ideas, illustrations and the CASTEP code [J]. *J Phys: Condens Matter*, 2002, 14(11): 2717-2744.
- 16 D Vanderbilt. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism [J]. *Phys Rev B*, 1990, 41(11): 7892-7895.
- 17 D M Ceperley, B J Alder. Ground state of the electron gas by a stochastic method [J]. *Phys Rev Lett*, 1980, 45(7): 566-569.
- 18 J P Perdew, A Zunger. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems [J]. *Phys Rev B*, 1981, 23(10): 5048-5079.
- 19 H J Monkhorst, J D Pack. Special points for Brillouin-zone integrations [J]. *Phys Rev B*, 1976, 13(12): 5188-5192.
- 20 T H Fischer, J Almlof. General methods for geometry and wave-function optimization [J]. *J Phys Chem*, 1992, 96(24): 9768-9774.
- 21 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.
- 22 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.

栏目编辑: 张浩佳