文章编号:1004-0609(2010)08-1623-06

$ZnRh_2O_4$ 电子结构与光学性质的第一性原理计算

马松山,徐慧,夏庆林

(中南大学 物理科学与技术学院,长沙 410083)

摘 要:利用基于密度泛函第一性原理的 GGA 方法,研究 $ZnRh_2O_4$ 的电子结构和光学性质。计算结果表明: $ZnRh_2O_4$ 具有明显的半导体能带结构特征,其带隙宽度为 1.084 eV,且在费米能级附近的态主要由 Rh 的 4d 态构 成。 $ZnRh_2O_4$ 的静态介电常数为 8.215,静态折射率为 2.866,介电函数吸收边位于 1.0 eV 附近。在能量为 0~8.44 eV 区域, $ZnRh_2O_4$ 的反射系数随着能量的升高而逐渐增大;随后随能量的增大而逐渐减小;在能量为 11.98 eV 时,达到极小值,然后随能量的增大,再次逐渐增大;在能量为 13.762 eV 时,再次达极大值,随后反射系数陡 降; $ZnRh_2O_4$ 的吸收系数的数量级达 10^5 cm⁻¹,且吸收主要发生在低能区,其电子能量损失谱的共振峰在 14.226 eV 处,与此能量时反射系数的陡降相对应。

关键词:ZnRh₂O₄;电子结构;光学性质;第一性原理;介电常数;反射系数;吸收系数;能量损失 中图分类号:TB303;TB34 文献标志码:A

First-principles calculations for electronic structure and optical properties of ZnRh₂O₄

MA Song-shan, XU Hui, XIA Qing-lin

(School of Physical Science and Technology, Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract: The first-principles calculations were carried out to investigate the electronic structure and optical properties of $ZnRh_2O_4$ using the method of the generalized gradient approximation (GGA) based on density functional theory. The results show that the band structure of $ZnRh_2O_4$ is a kind of semi-conducting material with wide-band gap of 1.084 eV. Near the Fermi level, Rh 4d is derived bands. The static dielectric constant of $ZnRh_2O_4$ is 8.215, and the static refractive index is 2.866. For the imaginary part of dielectric constant, the absorption starts at about 1.0 eV. When the energy is 0-8.44 eV, the reflection index increases with increasing energy, and decreases to the minimum till 11.98 eV, and then increases with the increase of the energy again till 13.762 eV. There is an abrupt reduction when the energy is a little higher than 13.762 eV, which corresponds to the peak of electron energy loss spectrum (EELS). The absorption coefficient is as large as 10^5 cm^{-1} , and the absorption mainly locates in the low energy region.

Key words: ZnRh₂O₄; electronic structure; optical properties; first-principles; dielectric function; refractive index; absorption coefficient; energy loss

透明导电氧化物(Transparent conducting oxides)薄 膜由于同时具有在可见光谱范围内的光学透明特性及 从绝缘相到金属相的可控电导特性,而被广泛应用于 太阳能电池及包括液晶显示器和有机发光二极管等平 板显示器的透明"金属"电极。KAWAZOE 等^[1]用透 明导电氧化物设计和构造了 p-n 异质结;KADO 等^[2] 用 ZnO 和 SrCu₂O₂等氧化物半导体材料构建透明导电 薄膜 p-n 异质结二极管;OHTA 等^[3]用透明导电氧化 物 SrCu₂O₂和 ZnO 制成的室温条件下正常工作的 p-n 异质结紫外发光二极管;TONOOKA 等^[4]在 400 温

基金项目:高等学校博士点专项科研基金资助项目(20070533075);湖南省科技计划资助项目(2009FJ3004)

收稿日期:2010-02-11;修订日期:2010-06-20

通信作者:马松山,讲师,博士;电话:0731-88877259;E-mail:songshan.ma@yahoo.com.cn

度下通过脉冲激光沉积的方法在玻璃衬底上制备了 Zn 氧化物、Cu-Al 氧化物及 In-Sn 氧化物薄膜,并研 究其电流-电压特性及光生伏打效应。目前,可实现 商业化的透明导电薄膜都是 n-型半导材料, 而 p-型透 明导电薄膜的发展将会引起一些新型仪器的出现及应 用,从而有望实现该技术的重大突破。然而,与n-型 透明导电薄膜材料相比,p-型透明导电薄膜材料的电 导率低得多,因此,近年来探寻具有高导电特性的 p-型透明导电薄膜材料成为材料学和物理学领域的一个 研究热点^[5]。2002 年, MIZOGUCHI 等^[6]研究发现, 含 Rh³⁺的化合物具有宽带隙半导体特性,是制备 p-型 透明导电薄膜的理想材料,并研究 ZnRh₂O₄其光电导 率及吸收谱。SINGH 等^[7]通过实验测量 ZnRh₂O₄ 光电 导率,并计算了其电子结构,研究表明 ZnRh₂O₄的带 隙为 1.2 eV。WILSIN-SHORT 等^[8]进一步研究 ZnRh₂O₄ 热电特性,发现 ZnRh₂O₄ 通过掺杂使其具有 足够大的载流子迁移率而转化成金属态,从而可用作 热电材料。BANERJEE 和 SINGH^[9]利用电化学方法研 究 ZnRh₂O₄ 的摩尔自由能及热容。最近, MANSOURIAN-HADAVI 等^[10]通过测量电导率及热 电系数的,研究烧结合成多晶 ZnRh₂O₄的导电机制, 发现 ZnRh₂O₄ 具有 0.25 eV 的激发能量 表明 ZnRh₂O₄ 是通过小极化子进行跳跃导电,因而电导率不高,同 时, ZnRh₂O₄具有接近 2.2 eV 的带隙, 满足 p-型透明 导电特性。

本文作者利用基于密度泛函第一性原理计算方法,通过几何结构优化,得到 ZnRh₂O₄的晶格参数, 在此基础上,计算得到 ZnRh₂O₄的能带结构、态密度、 分布密度,并对其介电常数、反射系数、吸收系数、 能量损失谱等光学性质进行研究。

1 计算模型和方法

ZnRh₂O₄ 属于尖晶石结构,其晶体结构的空间群为 Fd3m(227),其晶格参数如下:a=8.506Å,V=615.426Å³,其中 Zn 原子的原子占位为 8a(0,0,0),Rh 原子的原子占位为 16d(0.625,0.625,0.625),O 原子的原子占位为 32e(0.388,0.388,0.388)^[6],如图 1 所示。

计算采用基于第一原理计算密度泛函理论 (Density functional theory)结合平面波赝势方法的 Castep(Cambridge serial total energy package)软件 包^[11]。计算中,采用周期性边界条件,电子间的交换 关联函数采用广义梯度近似(GGA-PBE)^[12-13]方法,而



图 1 ZnRh₂O₄超原胞模型 Fig.1 Model of ZnRh₂O₄ cell

电子波函数则通过平面波基矢扩展,并采用模守恒赝 势描述电子-离子相互作用^[14]。第一布里渊区的 K 点 采样利用 Monkhorst 和 Pack 格式^[15],平面波截止能量 取 600 eV,布里渊区 K 点取样的网格参数选为 5× 5×5,自洽精度为 1.0×10⁻⁶ eV/atom。能量计算都在 倒易空间中进行,获得优化晶胞的结构,在此基础上 进一步计算电子结构,并根据获得的电子能带结构, 计算研究其光学性质。

在线性响应范围内,固体的宏观光学响应函数通 常可以由光的复介电函数 $\varepsilon(\omega)=\varepsilon_1(\omega)+i\varepsilon_2(\omega)$ 或复折射 率 $N(\omega)=n(\omega)+iP(\omega)$ 来描述,其中 $\varepsilon_1(\omega)$ 为介电函数实 部,且 $\varepsilon_1(\omega)=n^2(\omega)-P^2(\omega)$, $\varepsilon_2(\omega)$ 为介电函数虚部,且 $\varepsilon_2(\omega)=2n(\omega)P(\omega)$, $n(\omega)$ 为折射率, $P(\omega)$ 为消光系数。 根据直接跃迁概率的定义和 Kramers-Kronig 色散关系 可以推导出晶体的介电函数 $\varepsilon(\omega)$ 和复折射率 $N(\omega)$ ^[16]:

$$\varepsilon_{1}(\omega) = 1 + \frac{8\pi^{2}e^{2}}{m^{2}} \sum_{c,v} \int_{BZ} \frac{2}{2\pi} \frac{\left|eM_{cv}(K)\right|^{2}}{\left(E_{c}^{K} - E_{v}^{K}\right)^{2}} \cdot \frac{h^{3}}{\left(E_{c}^{K} - E_{v}^{K}\right)^{2} - h^{2}\omega^{2}} d^{3}K \tag{1}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2}{m^2 \omega^2} \sum_{c,v} \int_{BZ} \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot$$

$$\left|eM_{cv}(K)\right|^{2}\delta(E_{c}^{K}-E_{v}^{K}-h\omega)d^{3}K$$
(2)

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ [\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)]^{1/2} + \varepsilon_1(\omega) \}^{1/2}$$
(3)

$$P(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left[\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega) \right]^{1/2} - \varepsilon_1(\omega) \right\}^{1/2}$$
(4)

式中: c 和 v 分别表示导带和价带; e 为电子电量; m为电子质量; h 为普朗克常数; BZ 为第一布里渊区; K 为倒格矢; $|eM_{cv}(K)|^2$ 为动量跃迁矩阵元; ω 为圆频 率; E_c^K 和 E_v^K 分别为导带和价带上的本征能级。这些 基本关系式反映能级间电子跃迁产生光谱的发光机理, 是分析晶体能带结构和光学性质的理论依据。

当光入射到媒质表面时,部分光被反射,若入射 光强为 *J*₀,反射光强为 *J*['],则有反射系数 *R=J[']*/*J*₀。假 定晶面方向平行于光轴,那么反射系数对频率的依赖 关系将服从费米分布,可表示为^[17]

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)} + 1} \right|^2 \tag{5}$$

当光进入媒质以后,由于部分被吸收,所以光强 随进入媒质的深度 x 而指数衰减: $J(x)=J_0(1-R)e^{-lx}$,其 中 I 为吸收系数,表示光在媒质中通过单位距离时光 强度衰减情况,吸收系数随频率的依赖关系 $I(\omega)$ 可表 示为:

$$I(\omega) = \sqrt{2}(\omega) [(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{1/2} - \varepsilon_1]^{1/2}$$
(6)

电子能量损失谱(Electron energy loss spectroscopy, EELS)代表带电粒子以一定速度通过媒 质时的能理损失,理论上电子能量损失谱定义为负的 复介电函数的倒数虚部^[18],即

$$E(\omega) = -\operatorname{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\omega)}\right] = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\left[\varepsilon_1(\omega)\right]^2 + \left[\varepsilon_2(\omega)\right]^2}$$
(7)

2 结果与讨论

2.1 几何结构优化

为获得 ZnRh₂O₄ 的晶格属性,采用第一性原理 GGA 近似计算尖晶石结构 ZnRh₂O₄ 晶胞总能量 E 以 确定晶格参数,这可通过最小化晶胞总能得到。改变 ZnRh₂O₄ 的晶格体积 V,并对每个体积计算对应的总 能量,通过最小化总能得到晶格的优化体积 V_{00} ,计算

表 1 $ZnRh_2O_4$ 的晶格参数及原子坐标

Table 1Lattice parameters and atomic positions of ZnRh2O4

得到优化后的原子坐标及晶格参数列于表 1。通过与 Mizoguchi 等的实验结果比较可以看出,本文作者对 晶格参数优化结果与实验测量相差仅 0.5%,而 Zn 和 Rh 的原子占位与实验测量值完全吻合,O 原子的占位 计算结果与实验值的误差亦只有 0.5%。由此可见,理 论计算所得到的晶格参数及原子占位与实验测量结果 符合得很好。

2.2 ZnRh₂O₄的电子结构

为了探讨 ZnRh₂O₄的光学性质,首先计算其电子 结构特性。图 2 所示为 ZnRh₂O₄在布里渊区沿高对称 方向的电子能带结构。由图 2 可知,ZnRh₂O₄价带的 最高点和导带的最低点不在同一个 K 点处,在 W 点, ZnRh₂O₄具有价带最大值(VBM),在 X 点,具有导带 最小值(CBM),间接带隙宽为 1.084 eV,具有明显的 半导体能带结构特征。目前,对于 ZnRh₂O₄的带隙宽 度还存在很大的争议,MIZOGUCHI 等^[6]得到的实验 测量结果为 2.1 eV,MANSOURIAN-HADAVI 等^[10] 则认为其带隙接近 2.2 eV,但 SINGH 等^[7]通过光电导 率的测量和计算认为 ZnRh₂O₄的带隙宽度为 1.2 eV, 本研究的计算结果与 Singh 等所测量的结果较接近。

图 3 所示为 ZnRh₂O₄的总态密度(DOS)和分态密



图 2 ZnRh₂O₄的能带结构

Fig.2 Energy band structure of ZnRh₂O₄

Table 1 Lattice parameters and atomic positions of $\Sigma n Rn_2 O_4$								
Value	a/Å	<i>b</i> /Å	$c/\text{\AA}$	$V/\text{\AA}^3$	Atom	x/Å	y/Å	z/Å
Measured	8.506	8.506	8.506	615.426	Zn	0	0	0
					Rh	0.625	0.625	0.625
					О	0.388	0.388	0.388
Calculated	8.546	8.546	8.546	624.150	Zn	0	0	0
					Rh	0.625	0.625	0.625
					0	0.386	0.386	0.386



Fig.3 Total density of states of ZnRh₂O₄ (a) and partial density of states of O (b), Zn (c) and Rh (d)

度(PDOS)图。其中图 3(a)为 $ZnRh_2O_4$ 的总态密度分布, 图 3(b)、 (c)、(d)分别为 O、Zn、Rh 的分态密度。由 图 3 可知,在 $ZnRh_2O_4$ 的价带的低能段的-7.9~-6 eV 区域主要由 Zn 的 3d 构成,形成一个很强尖峰,从 -6~-2 eV 则主要源自 O 的 2p态,而在价带的高能段 的-2~0 eV 区域,O 的 2p态及 Rh 的 4d 态都有贡献, 但 Rh 的 4d 态贡献更大,可以认为在价带顶主要由 Rh 的 4d 态动构成,从导带底到 3.5 eV,同样 O 的 2p态及 Rh 的 4d 态都有贡献。实际上,正是由于在价带 顶和导带底都有 Rh 的 4d 态,在费米能级附近态密度 很大,从而对其物理特性产生很大的影响。同时,由 于 O 与 Rh 之间形成的共价键,2p态与 Rh 的 4d 态杂 化而导致晶体场的分裂,使空穴大都局域在 Rh 原子 附近,并向其周围的 O 原子扩展,从而可以很好地理 解 $ZnRh_2O_4$ 的 p-型电荷输运特性。

2.3 ZnRh₂O₄的光学性质

根据计算得到 ZnRh₂O₄的电子结构特征,并进一步计算了其介电常数、反射系数、吸收系数和能量损

失谱等光学性质。

图 4 所示为 ZnRh₂O₄的介电函数的实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 和虚 部 $\varepsilon_2(\omega)$ 与能量的关系。由图 4 可知,介电函数的实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 在频率为 0 时对应材料的静态介电常数,本研究 计算的结果为 $\varepsilon_1(0)=8.215$ 。随着能量(频率)的增加,



图 4 ZnRh₂O₄的介电函数

Fig.4 Dielectric function of ZnRh₂O₄

在 0~6.749 eV 区域, $\varepsilon_1(\omega)$ 呈现逐渐减小的趋势, 但在 1.285 eV、4.502 eV 附近分别有一小峰 A、B, 而从 6.749 eV 开始,随着能量(频率)的增加, $\varepsilon_1(\omega)$ 又逐渐增大, 且在 5.749~14.342 eV 区域, $\varepsilon_1(\omega) < 0$ 。介电函数的虚 部 $\varepsilon_2(\omega)$ 的吸收边位于 1.0 eV 左右,与价带顶到导带底 的带间跃迁 $W^V \rightarrow X^C$ 相对应。同时, $\varepsilon_2(\omega)$ 在 2.952 eV 和 5.575 eV 附近有两个明显的特征峰 C 和峰 D, 其中 在 2.952 eV 特征峰主要是由价带最高处(O 的 2p 态) 和导带最低处(Rh 的 5s 态)之间的光学跃迁引起,而在 5.575 eV 处的特征峰则是由 O 的 2p 态及 Rh 的 4d 态 导致;此外,在 14 eV 后, $\varepsilon_2(\omega)$ 趋向于 0。

图 5 所示为 ZnRh₂O₄ 的复折射率 $N(\omega)=n(\omega)+iP(\omega)$ 与能量的变化关系。由于 $\varepsilon_1(\omega)=n^2(\omega)-P^2(\omega)$,由图 5 可知, $h\omega=0$ 时, $P(\omega)=0$,由 $n_0^2=\varepsilon_1(0)=8.215$ 得 $n_0=2.866$,即静态的折射率 n_0 为 2.866。当光子能量大于 15.2 eV时, $P(\omega)\rightarrow 0$,此时 $\varepsilon_1(\omega)\approx n^2(\omega)$,且随着 $n^2(\omega)$ 的增大, $\varepsilon_1(\omega)$ 呈上升趋势。当 $n(\omega)$ 趋向 0 时, $\varepsilon_1(\omega)=-P^2(\omega)$, $n^2(\omega) < P^2(\omega)$,且在 5.749~14.342 eV之间, $n(\omega) < P(\omega)$,故 $\varepsilon_1(\omega) < 0$ 。



图 5 ZnRh₂O₄的复折射率

Fig.5 Complex refractive index of ZnRh₂O₄

图 6 所示为计算所得的 ZnRh₂O₄ 多晶体的反射系数、吸收系数及电子能量损失谱。由图 6(a)可知,在 0~8.44 eV 区域,反射系数 $R(\omega)$ 随着能量的升高而逐 渐增大,在 8.44 eV 处有一峰值;随后随能量的增大 而逐渐减小,在 11.98 eV 处达到极小值;然后随能量 的增大再次逐渐增大,在 13.762 eV 再次达极大值, 随后反射系数 $R(\omega)$ 发生陡降。由图 6(b)可知,吸收系数 $I(\omega)$ 在 0~6.57 eV 随光子能量的增大而增大,同时 吸收系数 $I(\omega)$ 的数量级达 10^5 cm⁻¹,在所研究的光子 能量区域内,吸收系数 $I(\omega)$ 在 6.57 eV 处达到峰值, 此后,随着光子能量的增大,吸收系数逐渐减小,表 明在高能区 ZnRh₂O₄ 对光子的吸收相对较少,当光子 能量大于 15 eV 时,吸收系数趋向于 0。

图 6(c)所示为 $ZnRh_2O_4$ 晶体的电子能量损失谱 $E(\omega)$,其特征峰与等离子体的振荡有关。由图 6(c)可 知, $ZnRh_2O_4$ 晶体的能量损失谱 $E(\omega)$ 的共振峰在 14.226 eV 处,此时,能量损失最大,与反射系数 $R(\omega)$ 在 13.762 eV 后的急剧陡降相对应。



图 6 ZnRh₂O₄ 光学反射、吸收和能量损失谱

Fig.6 Optical reflectivity spectrum (a), absorption coefficient (b) and energy-loss spectrum (c) of ZnRh₂O₄

3 结论

1) ZnRh₂O₄具有明显的半导体能带结构特征,其 带隙宽度为 1.084 eV,在费米能附近的-2~0 eV 价带 及从导带底到 3.5 eV 的导带区域,主要由 Rh 的 4d 态 构成。

ZnRh₂O₄的静态介电常数为 ε₁(0)=8.215,静态
 的折射率 n₀为 2.866,而介电函数的虚部 ε₂(ω)的吸收

边位于 1.0 eV 左右 ,同时 $\epsilon_2(\omega)$ 在 2.952 eV 和 5.575 eV 附近有两个明显的特征峰 ,在 14 eV 后 , $\epsilon_2(\omega)$ 趋向于 0。

3) ZnRh₂O₄的反射系数 $R(\omega)$ 在 0~8.44 eV 区域随 着能量的升高而逐渐增大,在 8.44 eV 有一峰值,随 后随能量的增大而逐渐减小,在 11.98 eV 处达极小值, 然后随能量的增大再次逐渐增大,在 13.762 eV 处再 次达极大值,随后反射系数 $R(\omega)$ 发生陡降。

4) 吸收系数 $I(\omega)$ 的数量级达 10^5 cm⁻¹, 且吸收主 要发生在低能区,在高能区对光子的吸收较少,其电 子能量损失谱 $E(\omega)$ 的共振峰在 14.226 eV 处,此时, 能量损失最大,并与此能量时反射系数 $R(\omega)$ 的急剧下 降相对应。

REFERENCES

- KAWAZOE H, YANAGI H, UEDA K, HOSONO H. Transparent p-type conducting oxides: Design and fabrication of p-n heterojunctions[J]. MRS Bulletin, 2000, 25(8): 28–36.
- [2] KADO A, YANAGI H, UEDA K, HOSONO H, KAWAZOE H. Fabrication of transparent p-n heterojunction thin film diodes based entirely on oxide semiconductors[J]. Applied Physics Letters, 1999, 75(18): 2851–2853.
- [3] OHTA H, KAWAMURA K I, ORITA M, HIRANO M, SARUKURA N, HOSONO H. Current injection emission from a transparent p-n junction composed of p-SrCu₂O₂/n-ZnO[J]. Applied Physics Letters, 2000, 77(4): 475–477.
- [4] TONOOKA K, BANDO H, AIURA Y. Photovoltaic effect observed in transparent p-n heterojunctions based on oxide semiconductors[J]. Thin Solid Films, 2003, 445(2): 327–331.
- [5] OHTA H, NOMURA K, HIRAMATSU H, UEDA K, KAMIYA T, HIRANO M, HOSONO H. Frontier of transparent oxide semiconductors[J]. Solid Stated Electronics, 2003, 47(12): 2261–2267.
- [6] MIZOGUCHI H, HIRANO M, FUJITU S, TAKEUCHI T, UEDA K, HOSIONO H. ZnRh₂O₄: A p-type semiconducting oxide with a valence band composed of a low spin state of Rh³⁺ in a 4d⁶ configuration[J]. Applied Physics Letters, 2002, 80(7): 1207–1209.
- [7] SINGH D J, RCI R C, MUSFELDT J L, AULUCK S, SINGH N, KHALIFAH P, MCCLURE S, MANDRUS D G. Optical properties and electronic structure of spinel ZnRh₂O₄[J]. Chemistry of Materials, 2006, 18(11): 2696–2700.
- [8] WILSON-SHORT G B, SINGH D J, FORNARI M, SUEWATTANA M. Thermoelectric properties of rhodates: Layered β-SrRh₂O₄ and spinel ZnRh₂O₄[J]. Physical Review B,

2007, 75: 035121.

- [9] BANERJEE A, SINGH Z. System Zn-Rh-O: heat capacity and Gibbs free energy of formation using differential scanning calorimeter and electrochemical cell[J]. Journal of Solid State Electrochemistry, 2009, 13(8): 1201–1207.
- [10] MANSOURIAN-HADAVI N, WANSOM S, PERRY N H, NAGRAJA A R, MASON T O, YE L H, FREEMAN A J. Transport and band structure studies of crystalline ZnRh₂O₄[J]. Physical Review B, 2010, 81(7): 075112.
- [11] SEGALL M D, LINDAN-PHILIP J D, PROBERT M J, PICKARD C J, HASNIP P J, CLARK S J, PAYNE M C. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code [J]. Journal of Physics:Condensed Matter, 2002, 14(11): 2717–2744.
- PERDEW J P, ZUNGER A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems[J]. Physics Review B, 1981, 23(10): 5048–5079.
- [13] CEPERLEY D M, ALDER B J. Ground state of the electron gas by a stochastic method[J]. Physics Review Letter, 1980, 45(7): 566–569.
- [14] ZHANG X Y, CHEN Z W, ZHANG S L, LIU R P, ZONG H T, JING Q, LI G, MA M Z, WANG W K. Electronic and optical properties of rock-salt aluminum nitride obtained from first principles[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2007, 19(42): 425231–5.
- [15] MONKHORST H J, PACK J D. Special points for Brillouin-zone integrations[J]. Physics Review B, 1976, 13(12): 5188–5192.
- [16] 沈学础. 半导体光谱和光学性质[M]. (第二版). 北京: 科学出版社, 1992: 76.
 SHEN Xue-chu. Spectroscopy and optical properties of semiconductor[M]. 2nd ed. Beijing: Science Press, 1992: 76.
- [17] 彭丽萍,徐 凌,尹建武.N掺杂锐钛矿TiO₂光学性能的第一 性原理研究[J].物理学报,2008,56(3):1585-1589.
 PENG Li-ping, XU Ling, YIN Jian-wu. First-principles study the optical properties of anatase TiO₂ by N-doping[J]. Acta Physica Sinica, 2008, 56(3): 1585-1589.
- [18] 尚学府,陶向明,陈文斌,陈会贤,王 森,谭明秋. MgB₂ 各向异性光学性质的第一性原理研究[J].物理学报,2008,57(9): 5838-5843.

SHANG Xue-fu, TAO Xiang-ming, CHEN Wen-bin, CHEN Hui-xian, WANG Miao, TAN Ming-qiu. Ab initio investigation of anisotropic optical properties of MgB₂[J]. Acta Physica Sinica, 2008, 57(9): 5838–5843.

(编辑 李艳红)