

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2018.01.022

# 第一性原理计算 Al 掺杂的正交相 Ca<sub>2</sub>Si 的电子结构及光学性质

邓永荣, 张春红, 闫万珺, 覃信茂, 周士芸, 陈少波  
(安顺学院贵州省高等学校航空电子电气与信息网络工程中心, 安顺 561000)

**摘要:** 采用基于第一性原理方法对 Ca<sub>2</sub>Si 和 Al 掺杂 Ca<sub>2</sub>Si 的能带结构、态密度和光学性质进行计算. 结果表明 Al 掺杂引起了晶格结构畸变, 晶胞体积增大; Al 掺杂 Ca<sub>2</sub>Si 使得费米能级插入价带中, Ca<sub>2</sub>Si 导电类型变为 P 型半导体, 禁带宽度由未掺杂时的 0.26 减小到 0.144 eV, 价带主要由 Si 的 3p, Al 的 3p 以及 Ca 的 4s 和 3d 共同贡献, 导带主要由 Si 的 3p 态贡献; 光学性质的结果显示, 由于 Al 掺入,  $\epsilon_1(0)$  值增大,  $\epsilon_2(\omega)$  向低能端移动, 吸收系数、复折射率增大, 反射率减小.

**关键词:** Al 掺杂 Ca<sub>2</sub>Si; 电子结构; 光学特性; 第一性原理

**中图分类号:** O474; O881.1      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0490-6756(2018)01-0135-06

## First-principles calculations on the electronic structure and optical properties of Al-doped orthorhombic Ca<sub>2</sub>Si

DENG Yong-Rong, ZHANG Chun-Hong, YAN Wan-Jun,  
QIN Xin-Mao, ZHOU Shi-Yun, CHEN Shao-Bo

(Engineering Center of Avionics Electrical and Information Network, Anshun University, Anshun 561000, China)

**Abstract:** By using the first-principles method, band structure, density of states and optical properties of Ca<sub>2</sub>Si and Al-doped Ca<sub>2</sub>Si were calculated in this paper. The results show that, after doping Al, the lattice structure distorted and the volume of lattice expands. The Fermi energy moved into the valence band, and the conduction type changed into P-type semiconductor, and the band gap decreased from 0.26 to 0.144 eV. The density of states of valance band near the Fermi energy is mainly composes of Si-3p, Al-3p, Ca-3d and Ca-4s, and the conduction band near the Fermi energy is mainly composes of Si-3p. Optical properties calculation indicates that after doping Al,  $\epsilon_1(0)$  of Ca<sub>2</sub>Si increased,  $\epsilon_2(\omega)$  moved to lower-energy, the absorption and the refractive index increased, while the reflectivity decreased.

**Keywords:** Al-doped Ca<sub>2</sub>Si; Electronic structure; Optical properties; First-principles

## 1 引言

Ca<sub>2</sub>Si 是一种新型的直接带隙半导体材料, 具有优异的电学特性和光学特性, 是一种潜在的理想

半导体材料. Ca<sub>2</sub>Si 有两种相结构, 一种是简单正交相, 此相为稳定相<sup>[1]</sup>, 实验值为 1.90 eV 的直接带隙, 理论值为 0.36 eV, 与实验值相差较大<sup>[2-3]</sup>. 另一种是在外力的作用下为稳定结构的立方相,

收稿日期: 2016-04-11

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(黔科合[LH字[2014]7507]); 贵州省高等学校航空电子电气与信息网络工程中心资助

作者简介: 邓永荣(1987-), 女, 硕士, 讲师, 主要从事光电子材料计算方面的研究. E-mail: dyr19870620@163.com

2003 年 Migas 等<sup>[4]</sup>的计算结果显示其带隙为 0.56 eV.  $\text{Ca}_2\text{Si}$  由寿命较长的 Ca、Si 元素组成,光子能量小于 4.5 eV 的范围内,光吸收系数大于  $\beta\text{-FeSi}_2$ <sup>[5]</sup>,是高效率的太阳能电池材料的备选材料之一.

$\text{Ca}_2\text{Si}$  作为新型的光电材料和热电材料,无论是实验上还是理论计算上都有许多研究. 实验上, Takagi 等<sup>[6-7]</sup>利用蒸发加热处理两步法首次制备了单相的  $\text{Ca}_2\text{Si}$  晶体; Matsui<sup>[3]</sup>利用置换法首次在  $\text{Mg}_2\text{Si}$  上制备出单相  $\text{Ca}_2\text{Si}$  薄膜; Tasuoka<sup>[8]</sup>在 Si(111)上制备了  $\text{Ca}_2\text{Si}$  薄膜; Yang 等<sup>[9]</sup>利用磁控溅射技术,在 Si(100)衬底上获得单一相直接迁移的  $\text{Ca}_2\text{Si}$  薄膜. 在理论方面, Imai 等<sup>[2]</sup>利用赝势平面波方法计算了正交相的  $\text{Ca}_2\text{Si}$  是带隙为 0.36 eV 的直接带隙半导体; Migas<sup>[4]</sup>利用(FLAPW-GGA)计算了  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的电子结构和光学性质进行计算,发现正交相为稳定相. 有部分关于  $\text{Ca}_2\text{Si}$  掺杂的研究,如:丰云等<sup>[10-11]</sup>对 K 掺杂的  $\text{Ca}_2\text{Si}$  正交相和立方向的电子结构和光学性质进行研究;冉耀宗等<sup>[12]</sup>对 Sc 掺杂的  $\text{Ca}_2\text{Si}$  正交相电子结构和光学性质进行研究;岑伟富等<sup>[13-18]</sup>对 P 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  正交相和(110)、(111)、(100)、(001)应变对 P 掺杂正交相和立方向  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的能带结构和光学性质的研究. 尚未发现 Al 掺杂的  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的光电性能的报道. 鉴于此,本文采用第一性原理方法,对 Al 掺杂正交相  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的光电性能进行全面的.

## 2 模型与方法

正交相  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的群空间为 Pnma(No. 62), 晶格常数为  $a = 0.7667 \text{ nm}$ ,  $b = 0.4779 \text{ nm}$ ,  $c = 0.9002 \text{ nm}$ <sup>[5]</sup>,每个胞有 8 个 Ca 原子和 4 个 Si 原子. 本文采用  $2 \times 2 \times 1$  的超胞(共 48 个原子)进行计算,用 1 个 Al 原子置换 Si 原子得到 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  计算模型. 图 1 为 Al 置换 Si 后的超胞模型.

所有计算由 CASTEP 软件包<sup>[19]</sup>来完成,首先用 BFGS 算法对晶格常数进行优化,交换关联势采用的是广义梯度近似(GGA)的方法,用超软赝势<sup>[20]</sup>处理离子实与电子之间的相互作用. 计算过程中选取 Ca、Si 的价电子组态分别为 Ca 的  $4s^2$ , Si 的  $3s^2 3p^2$ , Al 的  $3s^2 3p^1$ . 在总能量和电荷密度计算中,平面波的截断能为 310 eV,布里渊区积分采用  $3 \times 3 \times 3$  的 MonkhorSt-Pack 形式<sup>[21]</sup>的对称特殊 k 点方法.

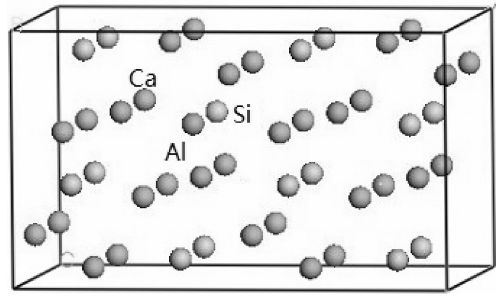


图 1 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的超胞模型  
Fig. 1 Supper cell of Al-doped  $\text{Ca}_2\text{Si}$

## 3 结果与分析

### 3.1 几何结构

表 1 为未掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的实验值及  $\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  几何结构优化的晶格常数. 由表 1 可知未掺杂的晶格常数与实验值很接近,掺杂入 Al 后,晶格常数  $a$  随 Al 的掺入而减小, $b$ 、 $c$  随 Al 的掺入而增大,体积略微增大,引起这种变化的原因主要是 Al 原子半径大于 Si 原子半径,当 Al 置换 Si 时就会引起晶胞体积的增大.

表 1 未掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的晶格常数

Tab. 1 Lattice constants of  $\text{Ca}_2\text{Si}$  and Al-doped  $\text{Ca}_2\text{Si}$

Sample	$a/\text{nm}$	$b/\text{nm}$	$c/\text{nm}$	$V/\text{nm}^3$
Un doped $\text{Ca}_2\text{Si}$ (实验值)	0.7667	0.4799	0.9002	0.3312
Un doped $\text{Ca}_2\text{Si}$ (计算值)	0.7610	0.4852	0.9080	0.3352
Al-doped $\text{Ca}_2\text{Si}$	0.7607	0.4863	0.9169	0.3391

### 3.2 能带结构和态密度

$\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  沿布里渊区高对称点方向的能带结构如图 2 所示. 从图 2(a)中可见  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的能带在导带最小值为 0.256 eV,价带 G 点的最大值为 0 eV. 因此, $\text{Ca}_2\text{Si}$  在 G 点表现出了直接带隙半导体的性质,带隙宽度为 0.26 eV,比 Imai 等<sup>[2]</sup>计算得到的 0.36 eV 略小,这是由于结构优化和收敛允许条件设置不同导致 K 点的走势有所偏差,从而带隙呈现微小偏差<sup>[13]</sup>.

从图 2(b)可知,掺入 Al 后,费米面向价带偏移并插在价带中间,Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  变为 P 型半导体,形成了带隙为 0.144 eV 的直接带隙半导体,控制其光电子传输行为的主要是空穴载流子. Al 原子的核外电子排布为  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$ , Si 原子核外电子排布为  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ , Al 的 3p 层比 Si 的 3p 层少一个价电子,Al 置换 Si 后形成以空穴为主的 P 型半导体.

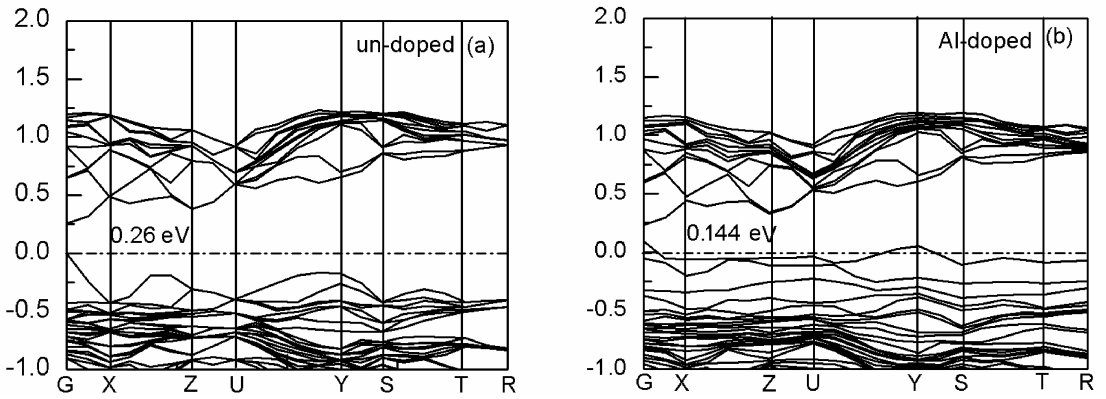


图 2  $\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  能带结构  
Fig. 2 Band structures of  $\text{Ca}_2\text{Si}$  and Al-doped  $\text{Ca}_2\text{Si}$

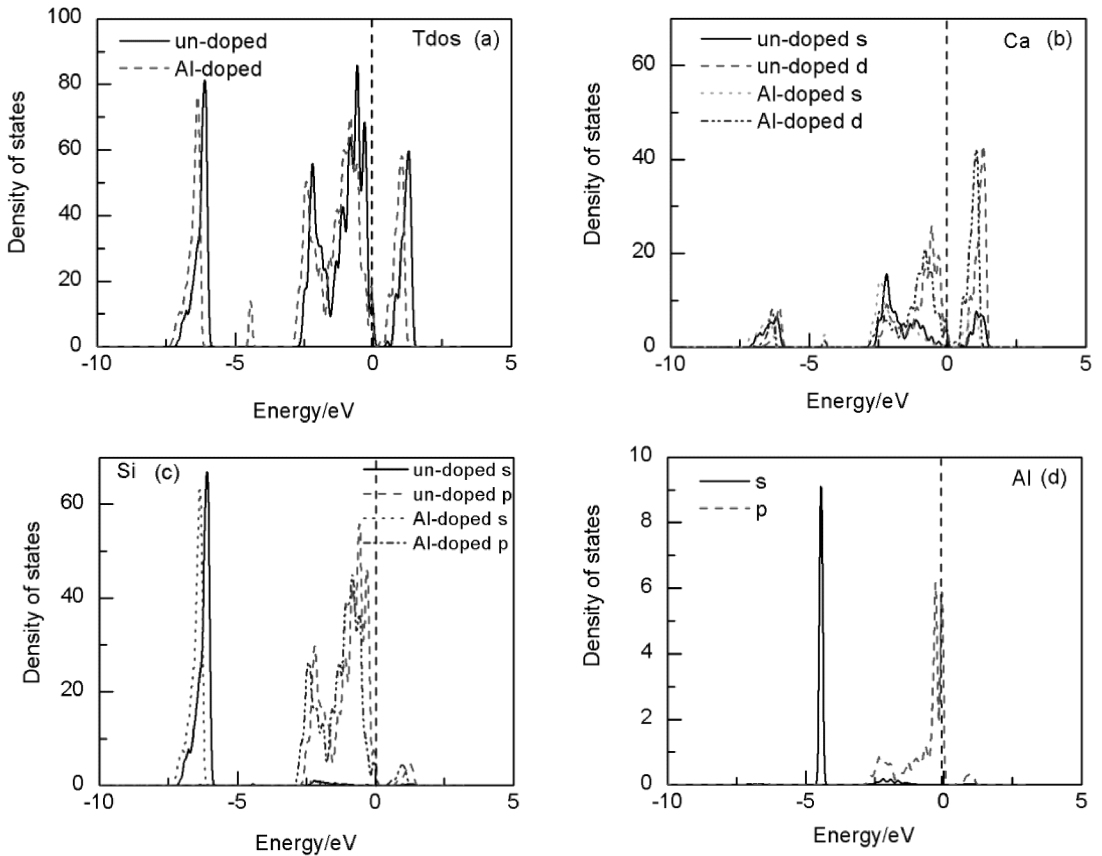


图 3  $\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  总态密度和 Ca、Si 及 Al 的分波态密度图  
Fig. 3 Total densities of states of  $\text{Ca}_2\text{Si}$  and Al-doped  $\text{Ca}_2\text{Si}$  and partial densities of states of Ca, Si and Al

图 3 为  $\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  总态密度和 Ca、Si 及 Al 的分波态密度图. 从图 3 可见, 在能量为  $-7.2 \sim -5.7$  eV 的能量范围内,  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的态密度主要是由 Si 的 3s 态电子贡献, Ca 的 4s 态和 3d 态贡献较小; 在价带顶,  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的态密度主要是由 Si 的 3p 态电子和 Ca 的 3d 态电子贡献, Ca 的 4s 态贡献较少; 在导带底,  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的态密度主要是由 Ca 的 3d 态电子贡献, Ca 的 4s 和 Si 的 3p 态贡

献较少. Al 掺杂后, 费米能级穿过价带, 在能量为  $-7.2 \sim -5.7$  eV 的能量范围内, Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的态密度主要由 Si 的 3s 态电子贡献, Ca 的 4s 态和 3d 态贡献较小; 在能量为  $-4.5 \sim 4.18$  eV 能量范围内出现峰值, 这主要是由 Al 的 3p 态电子贡献; 在价带顶, Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的态密度主要由 Si 的 3p 态和 Ca 的 3d 态贡献, Al 的 3p 态和 Ca 的 4s 态贡献较小. 导带底, Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的态密度主

要由 Ca 的 3d 态电子贡献.

### 3.3 光学性质

半导体的光学性质是半导体材料最重要的光学性质之一. 半导体的固体宏观光学特性可以通过复介电函数  $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$  得到或  $N(\omega) = N(\omega) + ik(\omega)$  得到. 其中

$$\epsilon_1 = n^2 - k^2 \quad (1)$$

$$\epsilon_2 = 2nk \quad (2)$$

介电函数的虚部  $\epsilon_2(\omega)$  可以通过计算电子在占据轨道和非占据轨道之间跃迁的矩阵元得到. 根据 Kramers-Kroing 色散关系得到介电函数实部  $\epsilon_1(\omega)$  以及吸收系数、折射率、反射系数等, 具体推导过程不再赘述.

3.3.1 复介电函数 介电函数的虚部  $\epsilon_2(\omega)$  反映了固体的能带结构和其他各种光谱信息, 是沟通带间跃迁微观物理过程与固体电子结构的桥梁. 图 4

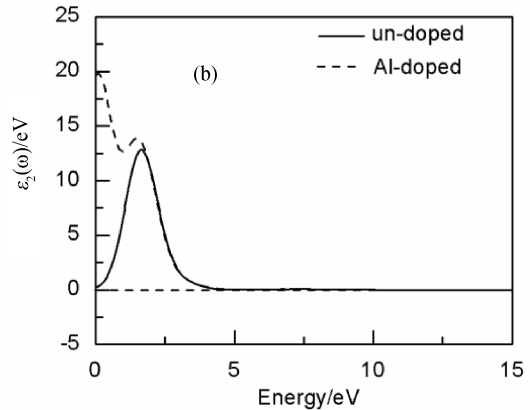
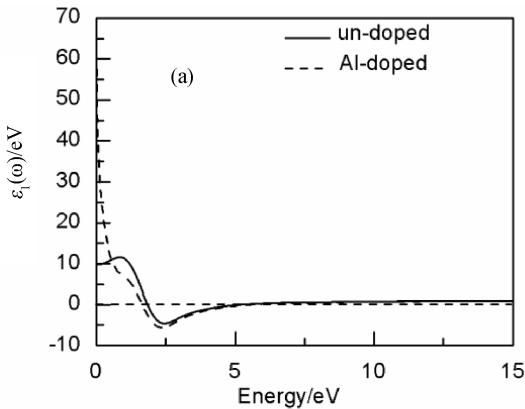


图 4  $\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的复介电函数

Fig. 4 Complex dielectric functions of  $\text{Ca}_2\text{Si}$  and Al-doped  $\text{Ca}_2\text{Si}$

3.3.2 复折射率 图 5 为  $\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的复折射率, 包括折射率  $n$  和消光系数  $K$ . 由图 5 (a) 可知, 正交相  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的  $n_0 = 3.168$ ,  $n$  的主要峰值出现在  $0 \sim 1.5$  eV 范围内. 在  $1.01$  eV 处出现最大峰值, 最大峰值为  $3.5042$ , 到达最大峰后随能量增加折射率减小. Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的折射率  $n_0 = 7.921$ , 最大值出现在  $0$  eV 处. 由图 5 (b) 可知,  $\text{Ca}_2\text{Si}$  消光系数  $K$  在能量值为  $2.118$  eV 处出现最大值, 最大值为  $2.574$ . 最大峰值出现之后,  $K$  随能量的增加而减小, 减小到  $10.10$  eV 处消光系数为  $0$ . Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的消光系数  $K$  出现两个峰值, 分别是  $2.030$  和  $2.783$ , 对应的能量值为  $0.4836$  和  $2.007$  eV, 在  $10.11$  eV 处消光系数为  $0$ .

$\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  两者相比较可得, Al 掺杂后的折射率和消光系数的变化趋势与未掺杂

为计算所得正交相  $\text{Ca}_2\text{Si}$  及 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的复介电函数. 由图 4 可以看出,  $\text{Ca}_2\text{Si}$  计算所得的静态介电常数  $\epsilon_1(0) = 10.04$  eV,  $\epsilon_2$  在  $E = 1.645$  eV 处出现第一峰, 能量在大于  $4.5$  eV 的区域范围内值趋近于零. Al 掺入后, Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的静态介电常数  $\epsilon_1(0) = 61.22$  eV,  $\epsilon_2$  出现两个明显的介电峰, 分别位于  $E = 0.01$  eV 和  $E = 1.49$  eV 处, 能量在大于  $4.5$  eV 的区域范围内值趋近于零. 两者比较可见, Al 掺入  $\text{Ca}_2\text{Si}$  后  $\epsilon_1(0)$  值增大,  $\epsilon_2(\omega)$  向低能端移动, 在能量为零处也有电子跃迁, 在  $0 \sim 1.49$  eV 范围内  $\epsilon_2$  值均比未掺杂时大, 在  $1.49 \sim 5$  eV 范围内  $\epsilon_2$  的值与未掺杂时相差不大. Al 掺入后提高电子的跃迁率, 这些现象可由图 2 中能带结构和图 3 中态密度图来解释. Si 的 p 层电子、Ca 的 s 层和 d 层电子向高能方向偏移, 价带也随之向高能方向偏移导致带隙变窄.

的  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的变化趋势一致. 掺杂后折射率和消光系数增大, 且都向低能端移动, 变化趋势与介电函数变化趋势一致.

3.3.3 吸收系数 由吸收系数与介电函数的关系式:

$$\alpha(\omega) = \frac{2\omega k(\omega)}{c} = \frac{\epsilon_2(\omega)\omega}{n(\omega)c} \quad (3)$$

可得到正交相  $\text{Ca}_2\text{Si}$  及 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的吸收系数. 计算结果如图 6 所示.  $\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的吸收系数变化趋势是一致的. 未掺杂的  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的吸收系数范围为  $0 \sim 10$  eV 的范围和  $20 \sim 25$  eV 的范围, 最大值出现在  $2.522$  eV 处, 值为  $96054.15 \text{ cm}^{-1}$ . 掺入 Al 后, 吸收范围虽然未发生明显变化, 在  $0 \sim 10$  eV 范围内, 光谱吸收边的临界能量值增加, 这与能带结构图中价带上移相对应, 吸收系数在  $2.5015$  eV 处

出现最大值, 值为  $101\,702.87\text{ cm}^{-1}$ , 与未掺杂相比峰值变大, 吸收系数随能量的变化趋势变平缓, 与消

光系数  $K$  的变化相一致.

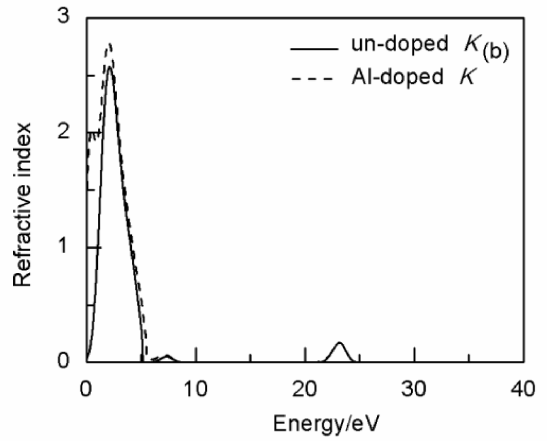
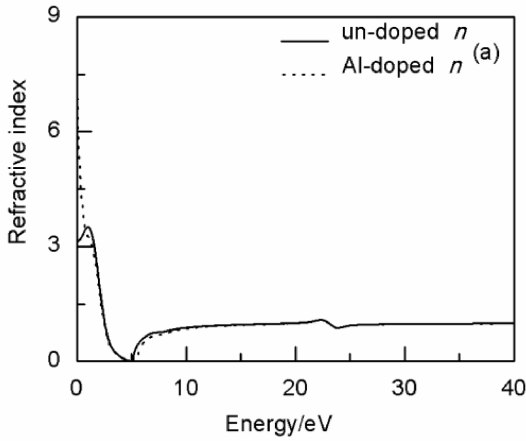


图 5  $\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的复折射率  
Fig. 5 Refractive indexes of  $\text{Ca}_2\text{Si}$  and Al-doped  $\text{Ca}_2\text{Si}$

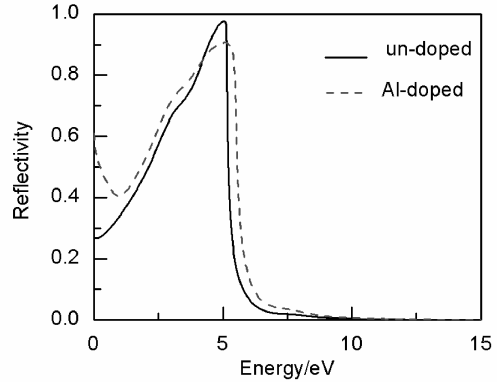
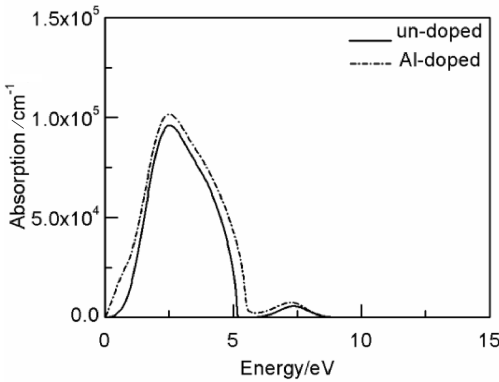


图 6  $\text{Ca}_2\text{Si}$  及 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的吸收系数

图 7  $\text{Ca}_2\text{Si}$  及 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的反射谱

Fig. 6 Absorption spectra  $\text{Ca}_2\text{Si}$  and Al doped  $\text{Ca}_2\text{Si}$

Fig. 7 Reflectivity spectra of  $\text{Ca}_2\text{Si}$  and Al doped  $\text{Ca}_2\text{Si}$

3.3.4 反射谱 图 7 是  $\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的反射谱. 由图 7 可知, 未掺杂的  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的反射主要发生在  $4.45\sim 5.12\text{ eV}$  的能量范围内, 反射率大于  $90\%$ , 在  $5.03\text{ eV}$  处出现最大值, 反射率为  $96.52\%$ , 此时折射率最小. 掺入 Al 后, 反射谱的范围向高能端微小移动, 反射主要发生在  $4.83\sim 5.24\text{ eV}$  的能量范围内, 这与能带结构中价带上移相对应, 最大反射率为  $90.65\%$ , 比未掺杂时低, 说明 Al 掺杂使  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的金属反射特性减弱.

级插入价带中, Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  变为 P 型半导体, 价带主要由 Si 的  $3p$ , Al 的  $3p$  以及 Ca 的  $4s$  和  $3d$  共同贡献, 导带主要由 Si 的  $3p$  态贡献; 光学性质的结果显示, 由于 Al 掺入,  $\epsilon_1(0)$  值增大,  $\epsilon_2(\omega)$  向低能端移动, 吸收系数、复折射率增大, 反射率减小, 提高了  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的电子跃迁率.

## 4 结 论

文章采用密度泛函的赝势平面波方法对  $\text{Ca}_2\text{Si}$  和 Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的能带结构、态密度和光学性质进行计算. 计算结果表明, Al 掺杂引起了晶格结构发生畸变, Al 掺杂  $\text{Ca}_2\text{Si}$  的晶胞体积增大, 禁带宽度由未掺杂时的  $0.26$  变为  $0.144\text{ eV}$ , 费米能

## 参考文献:

[1] Lebegue S, Arnaud B, Alouani M. Calculated quasiparticle and option properties of orthorhombic and cubic  $\text{Ca}_2\text{Si}$  [J]. Phys Rev B, 2005, 72: 085103.  
[2] Imai Y, Watanabe A. Energetics of alkaline-earth metal silicides calculated using a first-principle pseudo potential method [J]. Intermetallics, 2002, 10: 333.  
[3] Matsui H, Kuramoto M, One T, et al. Growth of  $\text{Ca}_2\text{Si}$  layers on  $\text{Mg}_2\text{Si}/\text{Si}(111)$  substrates [J]. Cryst Growth, 2002, 237: 2121.

- [4] Migas D B, Miglio L, Shaposhnikov V L, *et al.* Comparative study of structural, electronic and optical properties of  $\text{Ca}_2\text{Si}$ ,  $\text{Ca}_2\text{Ge}$ ,  $\text{Ca}_2\text{Sn}$  and  $\text{Ca}_2\text{Pb}$ [J]. *Phys Rev B*, 2003, 67: 205203.
- [5] Ivanenko L I, Shaposhnikov V L, Filonov A B, *et al.* Electronic properties of semiconducting silicides: fundamentals and recent predictions [J]. *Thin Solid Film*, 2004, 461: 141.
- [6] Takagi N, Sato Y, Matsuyama T, *et al.* Growth and structural properties of  $\text{Mg}_2\text{Si}$  and  $\text{Ca}_2\text{Si}$  bulk crystals [J]. *Appl Surf Sci*, 2005, 244: 330.
- [7] Busch G, Junod P, Katz U, *et al.* Electrical conductivity of the Intermetallic compounds  $\text{Ca}_2\text{Si}$ ,  $\text{Ca}_2\text{Sn}$ ,  $\text{Ca}_2\text{Pb}$ ,  $\text{Ca}_2\text{Sb}$  [J]. *Helv Phys Acta*, 1954, 27: 193.
- [8] Tasuoka H, Akagi N T, Okaya S, *et al.* Microstructures of semiconducting silicide layers grown by novel growth techniques [J]. *Thin Solid Films*, 2004, 461: 57.
- [9] Yang Y Y, Xie Q. A single phase semiconducting  $\text{Ca}$ -silicide film growth by sputtering conditions, annealing temperature and annealing time [J]. *J Mater Sci*, 2009, 44: 3877.
- [10] 丰云, 谢泉, 高冉, 等. K 掺杂立方相  $\text{Ca}_2\text{Si}$  电子结构及光学性能的研究 [J]. *纳米技术*, 2012, 9: 1.
- [11] 丰云, 谢泉, 高冉, 等. K 掺杂正方相  $\text{Ca}_2\text{Si}$  电子结构及光学性能的第一性原理计算 [J]. *材料热处理学报*, 2012, 33: 155.
- [12] 冉耀宗, 高冉, 黄浦, 等. Sc 掺杂正交相  $\text{Ca}_2\text{Si}$  电子结构及光学性能的第一性原理 [J]. *光谱实验室*, 2012, 29: 3500.
- [13] 岑伟富, 杨吟野, 范梦慧, 等. P 掺杂正交相  $\text{Ca}_2\text{Si}$  电子结构及光学性质的第一性原理计算 [J]. *光子学报*, 2014, 43: 0816003.
- [14] 岑伟富, 杨吟野, 范梦慧, 等. (111)应变对立方相  $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$  能带结构及光学性质的影响 [J]. *激光与光电子学进展*, 2014, 51: 091603.
- [15] 岑伟富, 杨吟野, 范梦慧, 等. (111)应变对正方相  $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$  能带结构及光学性质的理论研究 [J]. *分子科学学报*, 2015, 31: 101.
- [16] 岑伟富, 杨吟野, 范梦慧, 等. (001)应变对立方相  $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$  能带结构及光学性质的影响 [J]. *材料科学与工艺*, 2015, 23: 112.
- [17] 岑伟富, 杨吟野, 范梦慧, 等. (110)应变对立方相  $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$  能带结构及光学性质的影响 [J]. *原子分子物理学报*, 2015, 32: 1038.
- [18] 岑伟富, 杨吟野, 范梦慧, 等. (100)应变对立方相  $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$  光电特性的影响 [J]. *半导体技术*, 2014, 33: 707.
- [19] Segall M D, Philip Lindan J D, Probert M J. First principle simulation: ideas illustrations and the CASYEP code [J]. *J Phys: Condens Matter*, 2002, 14: 2717.
- [20] David Vanderbilt. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism [J]. *Phys Rev B*, 1990, 41: 7892.
- [21] Monkhorst H J, Pack J D. Special points for Brillouin-zone in tegration a reply [J]. *Phys Rev B*, 1997, 16: 1748.