

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2020.01.019

# Co-Mo 共掺杂 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 电子结构及透射率的第一性原理计算

方文玉<sup>1</sup>, 王晓雯<sup>2</sup>, 郑勤<sup>3</sup>, 高深<sup>4</sup>

(1. 湖北医药学院公共卫生与管理学院, 十堰 442000; 2. 湖北医药学院基础医学院, 十堰 442000;  
3. 湖北医药学院后勤处, 十堰 442000; 4. 武汉大学电气工程学院, 武汉 430079)

**摘要:** 采用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理平面波超软赝势方法, 计算了本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , Co、Mo 单掺杂以及 Co-Mo 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的电子结构和光学性质. 计算结果表明: Mo 单掺杂以及 Co-Mo 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的结合能较低, 比较容易合成. Co、Mo 掺杂均属于 n 型掺杂, 能够提升掺杂体系的载流子浓度, 改善  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的导电性. 掺杂体系的杂质能级主要由 Co-3d 态电子和 Mo-4d 态电子组成, 这些杂质能级是改变掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  光学性质的内在原因. 掺杂后, 吸收光谱发生红移现象, 且光学性质变化主要集中在低能量范围. 本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$  薄膜在 200~800 nm 范围内的透射率约为 92%, Mo 单掺杂和 Co-Mo 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  在 600~780 nm 波段内的透射率高达 93%~98%, 在 200~280 nm 的短波紫外光区域, Co 单掺杂的透射率最高可达 95%. 因此, 三种掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  适用于制备各类光学透射膜.

**关键词:**  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; 电子结构; 光学性质; 透射率

**中图分类号:** O641      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0490-6756(2020)01-0135-05

## First-principles calculation on the electronic structures and optical transmittance of $\text{Al}_2\text{O}_3$ codoped with Co-Mo

FANG Wen-Yu<sup>1</sup>, WANG Xiao-Wen<sup>2</sup>, ZHENG Qin<sup>3</sup>, GAO Shen<sup>4</sup>

(1. School of Public Health and Management, Hubei University of Medicine, Shiyan 442000, China; 2. Department of Basic Medicine, Hubei University of Medicine, Shiyan 442000, China; 3. Logistics Department, Hubei University of Medicine, Shiyan 442000, China; 4. School of Electrical Engineering, Wuhan University, Wuhan 430079, China)

**Abstract:** The electronic structures and optical properties of intrinsic, Co, Mo doped and Co-Mo codoped  $\text{Al}_2\text{O}_3$  compounds are calculated by using the first-principles plane-wave ultrasoft pseudopotential method based on the density functional theory. The results show that the binding energies of Mo single doping and Co-Mo co-doped  $\text{Al}_2\text{O}_3$  are low and easy to synthesize. Both Co and Mo dopings belong to the n-type doping, which can enhance the carrier concentration of the doping system, and thus improving the conductivity of  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . The impurity levels of the doped system are mainly composed of co-3d state electron and mo-4d state electron, which are the intrinsic factors that affect the optical properties of doped  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . After doping, the absorption spectrum is redshifted and the optical properties change mainly in a low energy range. The transmittance of the  $\text{Al}_2\text{O}_3$  film in the range of 200~800 nm is about 92%. The transmittances of the  $\text{Al}_2\text{O}_3$  doped by Mo single and co-doped by Co-Mo are as high as 93~98% in the

收稿日期: 2018-11-03

基金项目: 十堰市市级引导性科研项目(18Y03, 19Y06)

作者简介: 方文玉(1987-), 男, 湖北黄冈人, 硕士, 主要从事凝聚态物理研究. E-mail: 3103846203@qq.com

通讯作者: 王晓雯. E-mail: 472182110@qq.com

band of 600~780 nm. In the short-wave ultraviolet region of 200~280 nm, the transmittance of Co single doping can be as high as 95%. Therefore, three doped  $\text{Al}_2\text{O}_3$  can be used to prepare various optical transmission films.

**Keywords:**  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; Electronic structures; Optical properties; Transmittance

## 1 引言

$\text{Al}_2\text{O}_3$ 是自然界中十分常见的材料,被广泛用于工业和生活领域.  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 存在多种同质异形体,分别为 $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\beta$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ 和 $\gamma$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,其中 $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ 是低温下最稳定的相,具有低电导率和高硬度的特点,是很好的介电材料,在表面和薄膜领域有着广泛的应用. 有研究表明,通过材料掺杂能够使材料的结构、光电性质、热学性质等发生变化<sup>[1-3]</sup>. 例如,伏春平等<sup>[4]</sup>发现 Si 掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 可以使半导体的导带和价带发生移动,掺杂体系能隙变小. 王兴军等人<sup>[5]</sup>. 通过溶胶-凝胶法制备  $\text{Er}^{3+}$ - $\text{Yb}^{3+}$ 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 粉末,实验结果发现共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 粉末具有中心波长为 1.533  $\mu\text{m}$ 的光致发光(PL)特性. 近年来,掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 光学器件被运用到很多元器件<sup>[6]</sup>. 通过 Eu、Tb、Ce、Ab 和 Mn 掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 薄膜可用于平板显示器、光学放大器的电子器件<sup>[7-11]</sup>; 掺杂 Tb-Zn 可用来制作长余辉发光材料<sup>[12-13]</sup>,他们能够通过掺杂离子杂质能级与其他能级间激发-退激而发光. 因此,研究掺杂型  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 的电子结构与光学性质,对材料的机理研究有着重要意义. 目前,关于 Co、Mo 掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 的研究也有一些报道,例如,刘欣等人<sup>[14]</sup>通过溶胶凝胶法和浸渍法制备 Co/Fe/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ /cordierite 催化剂,发现 Co 掺杂可以增强催化剂抗  $\text{SO}_2$ 和  $\text{H}_2\text{O}$ 的能力;张玉涵等人<sup>[15]</sup>通过原位红外光谱法发现,在 Mo/ $\gamma$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ 催化剂中加入助剂 Co 对 Mo 吸附位起到显著改性作用. 以上都是实验研究,关于理论计算方面的研究尚未见报道. 因此,本文以 Co、Mo 单掺杂及共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 为研究对象,通过第一性原理计算分析掺杂体系的电子结构及透射率,为新的功能材料研究提供理论指导.

## 2 模型结构和计算方法

### 2.1 结构模型

计算中选取  $\alpha$ 型  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 晶胞模型,其对称群为 R-3C,晶格常数为  $a=b=4.759 \text{ \AA}$ ,  $c=12.991 \text{ \AA}$ ,  $\alpha=\beta=90^\circ$ ,  $\gamma=120^\circ$ . 掺杂时用 Co、Mo 替换晶胞中的 Al 原子,替换的位置如图 1 所示.

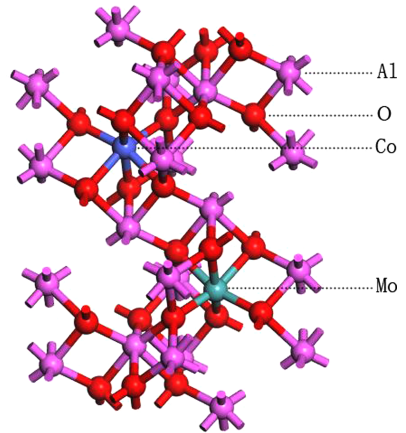


图 1 Co-Mo 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  晶胞模型  
Fig. 1 Model of Co-Mo codoped  $\text{Al}_2\text{O}_3$  supercell

### 2.2 计算方法

本文计算是由 CASTEP 软件来完成,基于密度泛函理论<sup>[16]</sup>结合平面波赝势方法的计算程序,采用周期性边界条件,运用广义梯度近似 GGA 的 PBE 泛函计算方法来处理电子间的交换关联能.

选取价电子组态分别为  $\text{Al}-3s^2 3p^1$ 、 $\text{O}-2s^2 2p^4$ 、 $\text{Co}-3d^7 4s^2$ 和  $\text{Mo}-4s^2 4p^6 4d^5 5s^1$ . 计算时选取  $1 \times 1 \times 1$ 的  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 的超晶胞掺杂母体,平面波截断能设置为  $E_{\text{cut}} = 450 \text{ eV}$ ,布里渊区积分采用  $3 \times 5 \times 2$  Monkhorst-Pack 特殊 K 点对全布里渊区求和,计算均在倒格矢中进行. 在自洽场计算中,能量的收敛精度为  $1.0 \times 10^{-5} \text{ eV/atom}$ ,每个原子上的受力不大于  $0.05 \text{ eV/nm}$ ,内应力收敛精度  $0.05 \text{ GPa}$ ,原子最大位移收敛标准  $1.0 \times 10^{-3} \text{ nm}$ ,计算各种体系时均进行结构优化.

## 3 计算结果与讨论

### 3.1 晶体结构

表 1 是本征及掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 优化后的晶格常数及掺杂结合能,可以发现掺杂后晶胞的晶格常数及体积均在增加. 这是因为 Co ( $0.072 \text{ nm}$ )和 Mo ( $0.062 \text{ nm}$ )的离子半径大于 Al ( $0.053 \text{ nm}$ )离子半径,形成的 Co-O 键和 Mo-O 键比 Al 键更长,同时,Co 和 Mo 替换 Al 后,使得离子多余正电荷之间相互排斥力增大,系统能量增高而导致晶胞体积

进一步增大<sup>[17]</sup>.

为了表征离子掺杂难易程度, 引入掺杂结合能的概念, 在电子在非自旋极化条件下, 掺杂结合能的表达式<sup>[18]</sup>:

$$E_f = E_T - E_{\text{Al}_2\text{O}_3} - E_x + E_{\text{Al}} \quad (1)$$

其中,  $E_f$  表示掺杂体系结合能,  $E_T$  表示掺杂后体系的总能量,  $E_{\text{Al}_2\text{O}_3}$  表示本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$  总能量,  $E_x$  和  $E_{\text{Al}}$  分别表示单个掺杂原子和 Al 原子的能量. 从表 1 可以看出, Co 单掺杂的结合能最大, 最不容易掺杂; 而 Mo 掺杂的结合能最低, 最容易掺杂, 掺杂后的  $\text{Al}_2\text{O}_3$  最稳定.

表 1 优化后的晶格常数和结合能

Tab. 1 Lattice constants and binding energies

	$\text{Al}_2\text{O}_3$	Co- $\text{Al}_2\text{O}_3$	Mo- $\text{Al}_2\text{O}_3$	Co-Mo- $\text{Al}_2\text{O}_3$
$a/\text{\AA}$	4.811	4.817	4.850	4.864
$b/\text{\AA}$	4.811	4.817	4.850	4.864
$c/\text{\AA}$	13.120	13.135	13.296	13.298
$V/\text{\AA}^3$	262.864	263.884	270.842	272.405
$E_f/\text{eV}$	—	0.766	-0.898	-0.399

### 3.2 能带结构和态密度分析

图 2 是本征及掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  能带图, 为便于分析, 选取费米能级附近 ( $-6 \sim 12$  eV) 的能带结构, 图 3 是本征及掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的分态密度, 这里选取  $-20 \sim 10$  eV 区间. 从图 2(a) 可以发现, 本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的价带顶部和导带底部都出现 G 点, 说明  $\text{Al}_2\text{O}_3$  是直接带隙半导体, 其禁带宽度  $E_g = 5.96$  eV, 这与高丽红等人<sup>[19]</sup> 的计算结果基本一致. 通过观察图 3(a) 发现, 导带主要由 Al-3s 和 Al-3p 组成, 价带则分为两个区域, 上价带 ( $-7 \sim 0$  eV) 主要由 O-2p 态电子组成, 下价带 ( $-18 \sim 16$  eV) 则由 O-2s 态电子组成. 从图 2(b)、(c) 可知, 与本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$  相比, Co、Mo 单掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  导带结构与之相似, 价带区域平缓, 价带和导带均发生下移, 并且在禁带中引入杂质能级, 费米能级相对靠近导带, 远离价带, 属于 n 型掺杂. Co-Mo 共掺杂后, 杂质能级变得更加丰富, 同时具有 Co、Mo 单掺杂的能带特征. 通过观察掺杂后的分态密度发现, 杂质能级主要由 Co-3d 态电子和 Mo-4d 态电子组成, 且掺杂原子态密度在费米面附近均存在一个峰值, 这能够增加掺杂体系的载流子浓度, 改善  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的导电性, 因此 Co、Mo 是制备低阻  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的合适掺杂元素. 此外, Mo 单掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  时, Mo-4d 态电子在费米面以下主要由两部分组成, 分别分布在  $-11 \sim -5$  eV 和  $-1 \sim 0$  eV, 这两部分电子与 O-2p 态电子相互作用,

使得 O-2p 态电子也劈裂为两部分, 由此产生禁带. 同样, 共掺杂时, Mo-4d 与 Co-3d 相互作用, Co-3d 也会被分为两部分, 同时, 在费米面附近 Co-3d 态电子的增加, 将会影响电子在各量子态之间的跃迁, 这也是掺杂改变  $\text{Al}_2\text{O}_3$  光学性质的根本原因.

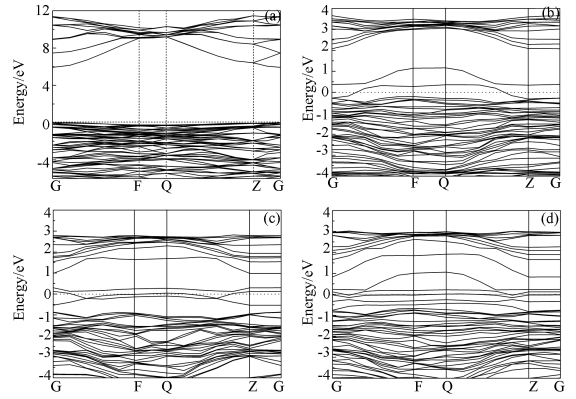


图 2 本征及掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  能带图: (a) 本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (b) Co 掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (c) Mo 掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (d) Co-Mo 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$

Fig. 2 The band structures of (a) pure  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (b) Co doped  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (c) Mo doped  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (d) Co-Mo codoped  $\text{Al}_2\text{O}_3$

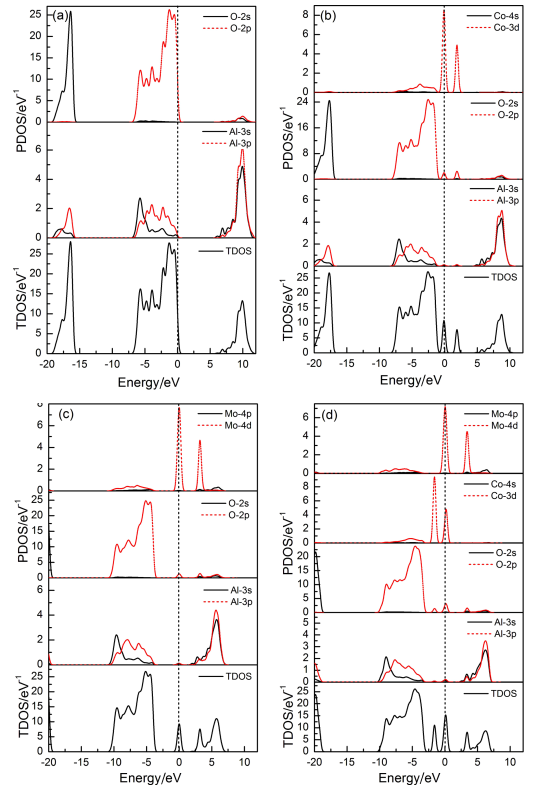


图 3 本征及掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  分态密度: (a) 本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (b) Co 掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (c) Mo 掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (d) Co-Mo 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$

Fig. 3 The DOSs of (a) pure  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (b) Co doped  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (c) Mo doped  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (d) Co-Mo codoped  $\text{Al}_2\text{O}_3$

### 3.3 透射率

为研究 Co、Mo 单掺杂及其共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的光学透射率,首先要计算各掺杂体系的吸收系数与反射率,计算时选取入射光的极化方向为  $\langle 100 \rangle$  的垂直照射。

吸收系数  $\alpha$  是指光子通过单位厚度的薄膜材料时能量的衰减分数. 半导体材料能级间的跃迁会造成光子能量的衰减,例如能带间的跃迁、带内的能级跃迁以及缺陷、掺杂、晶格振动等有关的跃迁过程都会对光子的吸收性能产生影响. 图 4 是本征及掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的吸收系数与反射率,从图 4(a) 可以看出,相对于本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , Co 单掺杂的反射率

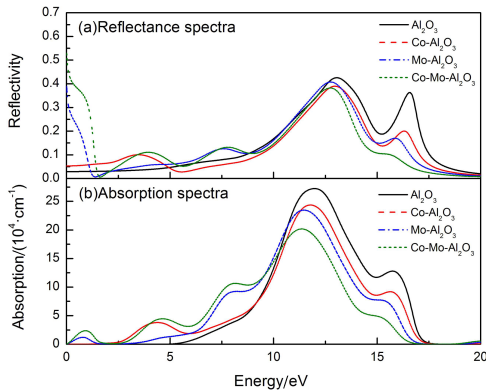


图 4 本征及掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  光学性质: (a) 反射率; (b) 吸收系数

Fig. 4 The optical properties of intrinsic and doped  $\text{Al}_2\text{O}_3$ : (a) reflectivity; (b) absorption

没有太大变化, Mo 单掺杂及 Co-Mo 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的反射率在低能量区域 ( $0 \sim 2$  eV) 有明显起伏, 对可见光及远红外光谱有较明显的反射效果. 观察图 4(b) 发现, 本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的吸收边约为 6 eV, 这与它的禁带宽度 5.96 eV 非常接近, 这是因为吸收边与光学带隙直接相关. 由于光-电子的耦合效应会引起电子在价带与导带间跃迁, 其中最小的跃迁能量起点应为禁带宽度, 因此  $\text{Al}_2\text{O}_3$  半导体的吸收边应该大于或等于带隙, 即  $6 > 5.96$  eV. 掺杂后, 体系的吸收边发生红移, 通过图 2 和图 3 可知, 这主要是因为掺杂原子的 d 态电子形成的杂质能级拉近了能级之间的距离, 电子在能级之间跃迁变得更容易, 吸收光子的能量也小于本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的禁带宽度. 同时, 通过观察吸收系数的峰值可以发现, 掺杂体系分别在 1、4 和 8 eV 附近出现峰值, 通过观察分态密度可知, 第一个峰值来自 Mo-4d 态电子价带与导带之间跃迁, 第二个峰值则是由价带中 O-2p 态电子向费米面上的 Co-3d 态电子跃迁产

生, 最后一个峰值则是由价带 O-2p 态电子向费米面上 Mo-4d 态电子跃迁产生的.

假设光子照射到厚度为  $d$  的薄膜, 忽略其光干涉效应, 则透射率  $T$  可表达为<sup>[20]</sup>:

$$T = \frac{(1-R)^2 \exp(-\alpha d)}{1-R^2 \exp(-2\alpha d)} \quad (2)$$

文献[6]通过中频反应磁控溅射制备  $\text{Al}_2\text{O}_3$  薄膜, 选取的厚度平均值为 650 nm, 为了便于比较, 计算时设薄膜厚度  $d=650$  nm, 计算得到本征及掺杂情况下  $\text{Al}_2\text{O}_3$  薄膜的光学透射率如图 5 所示.

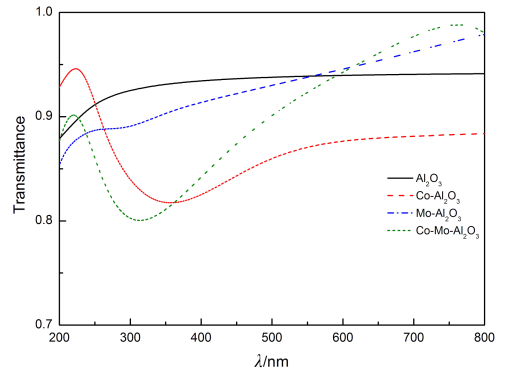


图 5 本征及掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的透射率

Fig. 5 The transmittances of intrinsic and doped  $\text{Al}_2\text{O}_3$

从图 5 可以看出, 本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$  薄膜在  $200 \sim 800$  nm 范围内的透射率约为 92%, 与实验结果相符. 根据能量守恒定律, 光子照射物体时, 分为吸收光、反射光、透射光三部分. 掺杂后,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  吸收边发生红移, 因此在可见光和近红外 ( $380 \sim 780$  nm) 的平均透射率减小, 其中 Co 单掺杂的透射率下降的最明显. 但是在  $600 \sim 780$  nm 波段内, Mo 单掺杂和 Co-Mo 共掺杂的透射率逐渐增大, 在 93%~98% 之间. 另外, 在  $200 \sim 280$  nm 的段波紫外光区域, Co 单掺杂的透射率相对较大, 最高可达 95%.

## 4 结论

采用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理平面波超软赝势方法, 计算了本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , Co、Mo 单掺杂以及 Co-Mo 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的电子结构和光学性质. 计算结果表明: Mo 单掺杂以及 Co-Mo 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的结合能较低, 比较容易合成. Co、Mo 掺杂均属于 n 型掺杂, 能够提升掺杂体系的载流子浓度, 改善  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的导电性. 此外, 掺杂体系的杂质能级主要由 Co-3d 态电子和 Mo-4d 态电子组成, 这些杂质能级拉近了级之间的距离, 电子在能级之间跃迁变得更容易, 这是影响掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  光学性质的内在原因. 掺杂后, 吸收光谱发生红移现

象,且光学性质变化主要集中要低能量范围. 本征  $\text{Al}_2\text{O}_3$  薄膜在 200~800 nm 范围内的透射率约为 92%, Mo 单掺杂和 Co-Mo 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  在 600~780 nm 波段内的透射率达到 93%~98%, 在 200~280 nm 的短波紫外光区域, Co 单掺杂的透射率相对较大, 最高可达 95%. 因此, 三种掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  适用于制备各类光学透射膜.

### 参考文献:

- [1] 张培新, 陈建华, 魏群. 掺杂材料分子模拟与计算 [M]. 北京: 科学出版社, 2012: 02.
- [2] 王腊节, 聂招秀. C 掺杂 AlN 的电子结构和光学性质的第一性原理研究[J]. 原子与分子物理学报, 2019, 32: 116.
- [3] 方祥, 马家君, 谢泉, 等. Al-N 共掺杂金红石相  $\text{TiO}_2$  的第一性原理研究[J]. 原子与分子物理学报, 2018, 35: 1015.
- [4] 伏春平, 孙凌涛, 程正富. Si 掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  电子结构的第一性原理计算[J]. 原子与分子物理学报, 2016, 33: 142.
- [5] 王兴军, 曹保胜, 雷明凯. Sol-gel 法制备  $\text{Er}^{3+}$ - $\text{Yb}^{3+}$  共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  粉末光致发光特性[J]. 光子学报, 2004, 38: 935.
- [6] 廖国进, 闻立时, 巴德纯, 等. 中频反应磁控溅射  $\text{Al}_2\text{O}_3$  薄膜的光学性质 [J]. 东北大学学报: 自然科学版, 2007, 28: 687.
- [7] Rimbach A C, Steud F, Ahrens B, *et al.*  $\text{Tb}^{3+}$ ,  $\text{Eu}^{3+}$ , and  $\text{Dy}^{3+}$  doped lithium borate and lithium aluminoborate glass: glass properties and photoluminescence quantum efficiency [J]. J Non-Cryst Solids, 2018, 499: 380.
- [8] Zuo C G, Huang J Z, Liu S Y, *et al.* Luminescence and energy transfer of  $\text{Tb}^{3+}$  doped  $\text{BaO-Gd}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$  glasses [J]. Renew Energ, 2018, 127: 863.
- [9] Zemla M R, Spiewak P, Wejrzanowski T, *et al.* Hydrophobic properties of  $\text{Al}_2\text{O}_3$  dope with rare-earth metals: *ab initio* modeling studies [J]. Spectrochim Acta A, 2017, 187: 181.
- [10] Choya A, Rivas B, Gonzalez-Velasco J R, *et al.* Oxidation of residual methane from VNG vehicles over  $\text{Co}_3\text{O}_4$ -based catalysts: comparison among bulk,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -supported and Ce-doped catalysts [J]. Appl Catal B: Environ, 2018, 237: 844.
- [11] Toemen S, Rosid S J M, Abu Bakar W A W, *et al.* Methanation of carbon dioxide over Ru/Mn/Ce- $\text{Al}_2\text{O}_3$  catalyst: In-depth of surface optimization, regeneration and reactor scale [J]. Phys Status Solidi A, 2018, 215: 1700895.
- [12] Dan A, Basu B, Echaniz T, *et al.* Effects of environmental and operational variability on the spectrally selective properties of W/WAIN/WAlON/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ -based solar absorber coating [J]. Sol Energ Mat Sol C, 2018, 185: 342.
- [13] 廖国进, 骆红, 闫绍峰, 等. 中频反应磁控溅射制备  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{:CeCl}_3$  薄膜及其光致发光特性[J]. 稀有金属材料与工程, 2009, 38: 700.
- [14] 刘欣, 苏亚欣, 董士林, 等. Co/Fe/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ /cordierite 催化  $\text{C}_3\text{H}_6$  选择性还原 NO 的实验研究[J]. 燃料化学学报, 2018, 46: 743.
- [15] 张玉涵, 凌凤香, 王少军, 等. Co-Mo/ $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  催化剂的原位红外光谱表征研究[J]. 燃料化学学报, 2013, 41: 710.
- [16] 王青, 赵伟刚, 戴剑锋, 等. Cu/N 共掺杂 ZnS 电子结构和光学性质的第一性原理计算[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2018, 55: 1019.
- [17] 王延峰, 黄茜, 宋庆功, 等. W 掺杂 ZnO 透明导电薄膜的理论及实验研究[J]. 物理学报, 2012, 61: 482.
- [18] 刘远全. Fe、Co、Ni 掺杂磷烯的第一性原理研究 [J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2017, 54: 1257.
- [19] 高丽红, 王富耻, 马壮, 等.  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的能带结构和光学函数的关系 [J]. 稀有金属材料与工程, 2009, 38: 774.
- [20] 何静芳, 郑树凯, 周鹏力, 等. Ga-Co 共掺杂 ZnO 导电性和透射率的第一性原理计算[J]. 物理学报, 2014, 63: 046301.

### 引用本文格式:

中文: 方文玉, 王晓雯, 郑勤, 等. Co-Mo 共掺杂  $\text{Al}_2\text{O}_3$  电子结构及透射率的第一性原理计算[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2020, 57: 135.

英文: Fang W Y, Wang X W, Zheng Q, *et al.* First-principles calculation on the electronic structures and optical transmittance of  $\text{Al}_2\text{O}_3$  codoped with Co-Mo [J]. J Sichuan Univ: Nat Sci Ed, 2020, 57: 135.