Au掺杂硅纳米线的稳定性和电子结构

梁伟华 王秀丽 丁学成 褚立志 邓泽超 傅广生 王英龙*

(河北大学物理科学与技术学院, 河北 保定 071002)

摘要: 采用基于密度泛函理论的第一性原理的方法, 对Au掺杂[100]方向氢钝化硅纳米线(SiNWs)不同位置的形成功能、能带结构、态密度及磁性进行了计算, 考虑了Au占据硅纳米线的替代、四面体间隙和六角形间隙的不同位置. 结果表明: Au偏爱硅纳米线中心的替代位置. Au掺杂后的硅纳米线引入了杂质能级, 禁带宽度变窄. 对于Au替代掺杂, 杂质能级主要来源于Au的 d 、 p 态和Si的 p 态, 由于Au的 d 态和Si的 p 态的耦合, Au掺杂硅纳米线具有铁磁性. 对于间隙掺杂, 杂质能级主要来源于Au的 s 态, 是非磁性的. 另外, 根据原子轨道和电子填充模型分析了其电子结构和磁性.

关键词: 硅纳米线; 第一性原理; 掺杂方式; 形成功能; 态密度; 磁性

中图分类号: O641

Stability and Electronic Structures of Au-Doped Silicon Nanowires

LIANG Wei-Hua WANG Xiu-Li DING Xue-Cheng CHU Li-Zhi DENG Ze-Chao
FU Guang-Sheng WANG Ying-Long*

(College of Physics Science and Technology, Hebei University, Baoding 071002, Hebei Province, P. R. China)

Abstract: We calculated the formation energies, band structure, density of states, and magnetic properties of Au-doped hydrogen-passivated silicon nanowires (SiNWs) along the [100] direction at different positions by first-principles method based on density functional theory. We considered the substitutional positions, the interstitial positions with tetrahedral symmetry, and the interstitial positions with hexagonal symmetry. The results show that Au preferentially occupies the center substitutional position of the silicon nanowire. The doping of Au into silicon nanowires introduces an impurity level near the Fermi level. The bandgap values were less than those of pure silicon nanowires. For the substitutionally doping of silicon nanowires the density of states near the Fermi level were mainly contributed to by the Au d and p orbitals and the Si p orbital. Ferromagnetic behavior of the substitutionally doped nanowire was observed upon coupling the Au d and Si p states. For the interstitial doping of silicon nanowires nonmagnetic behavior was predicted. In addition, we also interpret the electronic and magnetic properties in terms of a simple analysis based on the atomic orbitals and electron filling.

Key Words: Silicon nanowire; First-principles; Doping-method; Formation energy; Density of state; Magnetic property

1 引言

一维纳米结构(如硅纳米线), 具有许多不同于硅块材的新颖光电特性, 可作为光电应用领域的基

础材料, 如场发射器件、高效发光器件、激光和互连材料等,¹⁻³ 从而引起人们广泛的关注. 人们通过生长过程中掺杂其它杂质, 如将B, P, Li, Er等掺入硅纳

Received: February 21, 2011; Revised: April 29, 2011; Published on Web: June 1, 2011.

*Corresponding author. Email: hdwangyl@hbu.cn; Tel: +86-312-5977068.

The project was supported by the National Natural Science Foundation of China (10774036) and Natural Science Foundation of Hebei Province, China (E2008000631).

国家自然科学基金(10774036)和河北省自然科学基金(E2008000631)资助项目

© Editorial office of *Acta Physico-Chimica Sinica*

米线(SiNW), 可显著改变硅纳米线的电导性和光学性能, 制备出的掺杂硅纳米线比本征硅纳米线具有更好的场发射性能;⁴⁻⁶ 将过渡金属(如 Mn)掺入 SiNWs, 具有室温铁磁性, 可作为稀磁半导体材料;⁷ Au 作为深能级杂质掺入 SiNWs 中, 导致接触电阻减小, 形成的硅纳米线电阻率增加.⁸ 这些研究成果为掺杂 SiNWs 在光电子器件中的应用奠定了基础. 但使用掺杂硅纳米线制备电子器件还存在许多问题, 如掺杂 SiNW 的机理和性能的研究不够深入, 因此从理论上探讨杂质的掺杂方式和位置对 SiNWs 的影响是必要的.

目前, 基于密度泛函理论的第一性原理已经应用于计算过渡金属掺杂团簇的电子结构和磁性.^{9,10} 尤其是对一些非金属和金属(如 B、P、过渡元素等)掺杂到块材硅和纳米硅的电子性质进行了广泛研究,¹¹⁻¹⁷ 高浓度的 B 掺杂硅块材具有超导电性, 而 Mn 和 Fe 掺杂具有铁磁性, Cr 有铁氧磁性. 近几年, 由于硅纳米线独特的结构, 掺杂硅纳米线的第一性原理的研究吸引了很多人的注意.¹⁸⁻²¹ 低浓度的杂质替代掺杂 SiNW 具有 *n* 型半导体性(如 B、Al、Ga 等)和 *p* 型半导体性能(如 N、P、As 等), 且带隙不同. 过渡金属掺杂 SiNW 具有许多有趣的特性, 如半金属, 一维铁磁性等, Mn 和 Fe 掺杂硅纳米线具有较大的局域性磁矩,²²⁻²⁴ 可作为稀磁半导体纳米线材料. 早些时候, 我们曾研究了 Ni 替代掺杂 SiNWs 的电子结构和光学性质, 发现 Ni 掺杂可改变 SiNWs 的带隙, 使低能区的光吸收增强.²⁵ 而 Au 掺杂硅纳米线的第一性原理研究还未见报道. 本文采用第一性原理计算了 Au 掺杂硅纳米线的形成能、电子结构和磁性, 并对结果进行了详细的理论分析, 为硅纳米线材料的设计及应用提供理论依据.

2 理论模型和计算方法

2.1 理论模型

首先建立一个硅块材超胞, 通过裁掉相应超胞内的一些 Si 原子, 构建了 [100] 方向硅纳米线(SiNW)结构, 且用氢终止表面硅原子的悬键, 晶胞为 $\text{Si}_{50}\text{H}_{40}$, 在晶胞的 *x*、*y* 方向加一层大于 1 nm 的真空层, 这样可忽略相邻纳米线原子之间的相互作用, *z* 方向为周期性的一维结构. 将 Au 杂质掺入 SiNW 中, 采用替代、四面体间隙和六角形间隙三种方式, 其中替代掺杂是用一个 Au 原子替换 SiNW 中的一个 Si 原子, Au 原子与其相邻原子具有 T_d 对称性, 属于四面体替代掺杂构型(T_s); 间隙掺杂是将 Au 原子掺入 SiNW 的间隙位置, 若 Au 原子与其相邻原子具有 T_d 对称性, 称为四面体间隙掺杂构型(T_i); 若 Au 原子与其相邻原子具有 C_{3v} 对称性, 称为六角形间隙掺杂构型(H_i). 图 1 为 [100] 方向 Au 掺杂硅纳米线(Au-SiNWs)掺杂位置的结构图.

2.2 计算方法

采用 Accelrys 公司的 Materials Studio 软件中的 CASTEP 模块进行计算. 采用基于自旋极化密度泛函理论的赝势平面波法, 交换关联能采用广义梯度近似(GGA)中的 PBE, 平面波截断能 E_{cut} 取为 320 eV. 自洽精度设为每个原子能量收敛至 2×10^{-5} eV·atom⁻¹, 晶体内部应力收敛标准为 0.1 GPa, 原子间的相互作用力不超过 0.5 eV·nm⁻¹, 原子的最大位移收敛标准为 2.0×10^{-4} nm. 在模型的结构优化中, 采用了 BFGS 算法, 第一布里渊区 *k* 点为 $1 \times 1 \times 6$. 选取 Au 原子的 5*d* 和 6*s* 电子, Si 原子的 3*s* 和 3*p* 电子, H 原子的 1*s* 电子作为价电子. 为了获得精确的计算结果, 首先优化了 SiNW 的结构, 然后将 Au 以替代和间隙掺杂方式掺入 SiNW, 进行内坐标优化, 最后计算其电子结构.

3 计算结果与讨论

3.1 体系的稳定性和磁矩

为了分析 Au-SiNWs 的稳定性, 计算了 Au 原子

图1 Au-SiNWs 掺杂位置结构图

Fig.1 Au-SiNWs doped positions

(a) substitution (T_s); (b) tetrahedral interstitial (T_i); (c) hexagonal interstitial (H_i). The bigger balls are Si atoms and the smaller balls are H atoms. The numbers stand for different doped positions.

以不同的掺杂方式, 在 SiNW 中不同位置的总能量, 并分析其缺陷形成能 E_f , 定义 Au-SiNW 体系的缺陷形成能 E_f 为

$$E_f = E(\text{Au-SiNW}) - E(\text{SiNW}) - \mu_{\text{Au}} + n\mu_{\text{Si}} \quad (1)$$

其中 $n=1$ 表示替代掺杂, $n=0$ 表示间隙掺杂, $E(\text{SiNW})$ 与 $E(\text{Au-SiNW})$ 分别为 SiNW 中 Au 掺杂前后体系的总能量, μ_{Au} 和 μ_{Si} 分别为 Au 和 Si 原子的化学势(μ_{Au} 由计算 Au 块材的总能对原子数平均得到, 而 μ_{Si} 则由计算未钝化的 Si₅₀ 纳米线的总能对原子数平均得到).

图 2 给出 Au 掺杂硅纳米线的形成能和磁矩. 对于替代掺杂, 有四个不同的掺杂位置(如图 1(a)中的 1、2、3 和 4 位置), 由(1)式计算出的形成能(E_f)与掺杂位置的关系如图 2(a)所示, 从图中可以看出, 当 Au 的位置从中心移向表面时, 形成能逐渐增大, 表面位置比中心位置高 1.10 eV, 结果表明中心位置形成能最低, Au 占据中心位置更稳定. 从图 2(a)中的磁矩数据可知, Au 位于中心替代位置的 Au-SiNW 磁矩($0.951\mu_B$)小于其它位置的磁矩($2.985\mu_B$, $2.997\mu_B$ 和 $2.999\mu_B$), 说明 Au-SiNW 的磁矩的大小与 Au 原子掺杂位置有关. 这是由于 Au-SiNW 的磁矩的大小与 Au 和周围原子配位情况、对称性有直接的依赖关系, 杂质 Au 替代中心位置的 Si, 比替代其他位置 Si 的对称性高, 而对称性高会使得轨道交换劈裂减小, 导致磁矩减弱. 对于四面体间隙掺杂, 有三个不同的掺杂位置(如图 1(b)中的 1、2 和 3 位置), 其形成能与掺杂位置的关系如图 2(b)所示. 从图 2(b)可知, 随着掺杂位置从内部向表面移动, 其形成能逐渐升

高. 1 位置的形成功能最小, 表面位置的形成功能最大, 这说明 Au 原子喜欢位于硅纳米线内部四面体间隙位置. 对于六角形间隙掺杂, 有四个不同的掺杂位置(图 1(c)中的 1、2、3 和 4 位置), 图 2(c)给出形成能与掺杂位置的关系. 随着掺杂位置从内部向表面移动, 2 位置的形成功能最小, 这说明 Au 原子更喜欢位于硅纳米线次表面的六角形间隙位置. 从图 2(b, c)中的磁矩数据可知, Au 位于所有间隙位置的 Au-SiNWs 磁矩都为零.

表 1 给出三种构型中 Au-SiNWs 最稳定位置的形成功能、磁矩、Si-Si 和 Si-Au 距离的数值, 从表 1 中可以看出, T_s 构型与 T_s 和 H_s 构型的形成功能差值分别为 0.85 和 0.77 eV, 而 H_s 与 T_s 构型的形成功能差值为 0.08 eV, 即 Au 占据替代位置的形成功能最小, Au 占据六角形间隙位置的形成功能与占据替代位置的形成功能比较接近, 这说明 Au 原子占据替代位置是最稳定的掺杂方式, 其次是六角形间隙位置. 文献²⁶认为, 金在硅单晶中扩散替代行为起控制作用, 金原子以替代的方式最终均匀分布在硅中的, 这与我们的计算结果是一致的. 三种构型中 Si-Si 键长基本不变, 而 Si-Au 距离相对于本征 SiNW 的键长都有所增加, 这是由于当用 Au 替代 Si 时, Au 的原子半径大于 Si 的半径, 会产生晶格畸变, 导致 Si-Au 键长增加; 当 Au 原子占据间隙位置时, Au 原子与近邻原子发生排斥作用, 使得 Si-Au 距离增大. 对于 Si-Au 距离来说, H_s 构型中 Si-Au 距离最长; T_s 构型中 Si-Au 键长最短, 最接近于 Si-Si 键长, 这表明替代掺杂使得 Si-Au 间相互作用最强, 因此 Au 替代 Si 是最稳定的掺杂方式. 从表 1 中可知, Au 替代掺杂硅纳米线是铁磁性的, 而 Au 间隙掺杂硅纳米线是非磁性的, 这表明 Au 掺杂方式会影响 SiNW 的磁性.

3.2 电子结构

选择 Au-SiNWs 中 T_s 、 T_i 和 H_i 构型中最稳定位置, 分别计算了其能带结构、态密度和原子轨道布居数. 表 2 为不同构型 Au-SiNWs 中 Au 原子的轨道

图 2 Au 掺杂硅纳米线的形成能(E_f)和不同位置(见图 1)不同构型 SiNWs 的磁矩

Fig.2 Formation energies (E_f) and magnetic moment of Au atom at different positions (Fig.1) of SiNWs with different configurations
 $1\mu_B=0.972 \times 10^{-23} \text{ A} \cdot \text{m}^2$

表 1 不同构型 Au 掺杂硅纳米线的形成能、磁矩、Si-Si 和 Si-Au 距离

Table 1 Formation energies, magnetic moment, Si-Si and Si-Au distances of Au-SiNWs for different configurations

Configuration	E_f/eV	$d_{\text{Si-Si}}/\text{nm}$	$d_{\text{Si-Au}}/\text{nm}$	m/μ_B
T_s	1.99	0.233	0.247	0.951
T_i	2.84	0.235	0.253	0
H_i	2.07	0.235	0.268	0

表2 不同构型Au原子的轨道布居数和电荷转移数
Table 2 Orbital populations and charge transfers of Au atom for different configurations

Configuration	Orbital population			Total charge/e	Charge transfer/e
	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>		
T_s	0.97	0.32	9.58	10.87	0.13
T_i	0.96	0.10	9.64	10.70	0.30
H_i	0.97	0.02	9.64	10.63	0.37

布居数和电荷转移数,从表2中可以看出,由于共价效应,掺杂SiNWs中Au原子的5*d*和6*s*电子不同于孤立的Au原子(5*d*¹⁰6*s*¹),*d*轨道的部分电子会发生转移.对于 T_s 构型,Au原子有部分的*d*电子转移到*p*轨道,说明Au原子的*d*轨道与Si的*p*轨道会发生耦合,而 T_i 和 H_i 构型几乎没有电子转移到*p*轨道, T_s 、 T_i 和 H_i 电荷转移数分别为0.13*e*、0.30*e*和0.37*e*.

图3为SiNW和Au-SiNWs的能带结构图.为了与掺杂的情况进行比较,首先计算了SiNW的能带结构,从图中可以看出, SiNW是直接带隙半导体,其禁带宽度为2.60 eV.这一结果比实际SiNW的禁带宽度要小.这主要是由于广义梯度近似(GGA)不能准确计算带隙值,但并不影响对SiNW的电子结构的理论分析.从图3中还可以看出, T_s 、 T_i 和 H_i 构型中Au的掺入没有改变硅纳米线的半导体性质,仍是直接带隙半导体材料,而是引入了杂质带.对于Au替代掺杂SiNW(T_s 构型),Au充当受主,由于Au与Si的相互作用,在费米能级附近出现两条杂质能级,一条在费米能级上,另一条在费米能级之下,其禁带宽度为1.36 eV.对于Au间隙掺杂SiNW,Au充当施主, T_i 构型中杂质能级在费米能级附近,其禁带宽度为1.46 eV; H_i 构型中杂质能级跨在费米能级上,其禁带宽度为1.47 eV.与未掺杂SiNW相比,掺杂后SiNWs的带隙普遍减小,Au位于SiNW

图3 SiNW和Au-SiNWs的上自旋的能带结构图
Fig.3 Band structure of majority spin SiNW and Au-SiNWs with three different configurations
The zero of the energy scale is set at the Fermi level.

的替代和间隙位置,分别充当了受主杂质和施主杂质的作用.

图4(a)为Au替代掺杂硅纳米线上自旋(majority spin)和下自旋(minority spin)的总态密度图(TDOS).从图中可看到,由于Au替代硅纳米线中心的硅原子,上自旋和下自旋电子的总态密度分布存在着差别,具有不对称性,且在带隙中引入杂质峰a和b.在费米面附近,下自旋峰a和b的位置相对于上自旋向高能方向偏移,这表明体系中的电子通过交换相互作用出现了自旋有序排列,在费米能级(图中竖虚线)以下的占据态中,经对态密度进行积分计算知上自旋的电子数多于下自旋的电子数,因此对外表现出净磁矩为0.951 μ_B ,呈现铁磁性.图4(b)给出Au的分态密度图(PDOS).从图中可以看出,能量为-6.0 ~ -4.0 eV的价带区的态密度主要由Au的*d*电子的贡献的,费米能级附近峰a和b的态密度,来源于Au的*d*电子和*p*电子以及Si的*p*电子的贡献.这是由于Au原子的*d*态电子和Si的*p*态电子轨道重叠加剧,相互排斥作用减弱.为了更好地理解费米附近的能级,图5给出 T_s 、 T_i 和 H_i 构型中Au的*d*态和Si的*p*态上自旋的分态密度图(PDOS),从图5(a)中可看出, T_s 构型中费米能级附近Au的*d*态两个峰与Si的*p*态两个峰几乎是完全对应的,显示了Au的*d*轨道和Si的*p*轨道之间有非常强的耦合. DOS的结果也可以从Au的*s*和*d*电子及Si的*p*电子的电子分布来了解. Au原子*d*轨道有5个简并轨道,由于电子的交换作用,分为上自旋和下自旋,在四面体晶体场的作用,使得Au的*d*轨道分裂为三重简并的*t₂*轨道和双重简并的*e*轨道,*e*轨道低于*t₂*的轨道.由于*d*

图4 (a) Au-SiNW (T_s 构型)的总态密度; (b) Au原子的分态密度

Fig.4 (a) Total density of states (TDOS) for Au-SiNW (T_s configuration); (b) partly DOS (PDOS) of Au
Positive (negative) values refer to up (down) spin component.
The zero of the energy scale is set at the Fermi level.

图5 Au-SiNWs上自旋Au 5*d*和Si 3*p*的分态密度
Fig.5 Partial densities of states of majority spin Au 5*d* and Si 3*p* for different configurations

(a) T_c ; (b) T_i ; (c) H_i . The zero of the energy scale is set at the Fermi level.

轨道中的 t_2 轨道与Si的 p 轨道具有相同的对称性, 它们可以轨道组合, 形成 t_2 成键轨道和 t_2 反键轨道. 对于 e 轨道仍然存在或者收到少许的扰动, 达到能量和结构上的稳定, 是非键轨道. $p-d$ 耦合后的轨道能级顺序为 $e_+ < t_{2+} < t_{2-} < e_- < t_{2+} < e_-$ (+、-分别表示上自旋和下自旋),²⁴ 对于AuSi的13个电子, 按照上述能级填充, 有净磁矩 $3\mu_B$, 这与图2(a)中2、3和4位置的Au-SiNW的磁矩 $2.985\mu_B$ 、 $2.997\mu_B$ 和 $2.999\mu_B$ 的计算结果是一致的. 而1位置的Au-SiNW的磁矩 $0.951\mu_B$ 与我们预测结果不同, 这是因为中心替代 T_c 构型, 对称性高, 电子交换分裂比晶体场分裂的小, 导致磁矩减小.

图6(a)和图7(a)分别为 T_i 和 H_i 构型上自旋和下自旋的总态密度(TDOS). 从图中可以看到, 上自旋

图6 (a) Au-SiNW (T_i 构型)的总态密度; (b) Au原子的分态密度
Fig.6 (a) Total density of states for Au-SiNW (T_i); (b) PDOS of Au

Positive (negative) values refer to up (down) spin component.
The zero of the energy scale is set at the Fermi level.

图7 (a) Au-SiNW(H_i 构型)的总态密度及(b) Au原子的分态密度
Fig.7 (a) Total density of states for Au-SiNW(H_i); (b) PDOS of Au

Positive (negative) values refer to up (down) spin component;
The zero of the energy scale is set at the Fermi level.

和下自旋的总态密度分布具有对称性, 且在带隙中引入杂质峰c (或e). 在费米能级(图中竖虚线)以下的占据态中, 经对态密度进行积分计算知, 上自旋的电子数等于下自旋的电子数, 因此对外表现出磁矩为零, 是非磁性的. 图6(b)和图7(b)分别给出Au的分态密度图. 从图中可知Au的 d 态电子主要分布在能量为 $-8.5 \sim -5.0$ eV(T_i)和 $-6.0 \sim -2.0$ eV(H_i)的价带区; 费米能级附近的峰c (T_i)和峰e (H_i)的态密度, 都来源于Au的 s 态电子的贡献, 这是由于Au位于硅纳米线的间隙位置, 产生局域化的 s 电子恰在费米能级附近. 间隙位置的Au掺杂的情况不同于替代位置. 四面体间隙掺杂仍然和替代掺杂有相同的对称性, d 轨道分裂为双重简并的 e 轨道和三重简并的 t_2 轨道, t_2 轨道能量低于 e 轨道能量. 四面体和六角形间隙位置都没有发生Au的 d 轨道和Si的 p 轨道耦合, 这可从图5(b)和(c)给出 T_i 和 H_i 构型中费米能级附近Au的 d 和Si的 p 自旋向上的分态密度图中看出. Au的 d 轨道的能级顺序 $t_{2+} < e_+ < t_{2-} < e_-$, 对于Au的10电子, 是全满的情形, 磁矩为 μ_B , 预测与计算相符.

4 结 论

利用基于密度泛函理论的第一性原理的方法, 计算了Au-SiNWs的形成能、能带结构、态密度和磁性, 结果发现: Au-SiNWs的稳定性与掺杂方式及掺杂位置有关, Au中心替代掺杂硅纳米线的形成能低, 这说明Au更容易以替代中心Si位置存在于SiNW. 分析Au-SiNWs的能带结构和态密度图得

出, 相对于未掺杂 SiNW 而言, Au-SiNWs 仍具有直接带隙半导体的性质, 在带隙处产生了杂质带, 禁带宽度普遍变窄; 对于替代掺杂, Au 充当受主, 费米能级附近的杂质带主要来源于 Au 的 d 态和 p 态电子以及 Si 的 p 态电子贡献, 这主要是由于 Au 的 d 态与 Si 的 p 态轨道耦合, 体系中的电子通过交换相互作用出现了自旋有序排列, 呈现铁磁性; 对于间隙掺杂 Au-SiNWs, Au 充当施主, 费米能级附近的杂质带主要来源于 Au 的 s 态电子贡献, 是非磁性半导体材料. 可见, 在 SiNW 掺入过渡金属 Au, 可以大大改进 SiNW 的电子结构, 为 SiNW 在电子器件的应用研究提供了一定的理论基础.

References

- Cui, Y.; Zhong, Z.; Wang, D.; Wang, W.; Lieber, P. *Nano Lett.* **2003**, 3 (2), 149.
- Hu, S. F.; Wang, W. Z.; Liu, S. S.; Wu, Y. C.; Song, S. L.; Huang, T. Y. *Solid State Commun.* **2003**, 125, 351.
- Duan, X. F.; Huang, Y.; Agarwal, R.; Lieber, C. M. *Nature* **2003**, 421, 241.
- Tang, Y. H.; Sun, X. H.; Au, F. C. K.; Liao, L. S.; Peng, H. Y.; Lee, C. S.; Lee, S. T.; Sham, T. K. *Appl. Phys. Lett.* **2001**, 79, 1673.
- Zhou, G. W.; Li, H.; Sun, H. P.; Yu, D. P.; Wang, Y. Q.; Huang, X. J.; Chen, Q. L.; Zhang, Z. *Appl. Phys. Lett.* **1999**, 75, 2447.
- Huang, C. T.; Hsin, C. L.; Huang, K. W.; Lee, C. Y.; Yeh, P. H.; Chen, L. J. *Appl. Phys. Lett.* **2007**, 91, 093133.
- Wu, H. W.; Tsai, C. J.; Chen, L. J. *Appl. Phys. Lett.* **2007**, 90, 043121.
- Landman, U.; Barnett, R. N.; Scherbakov, A. G.; Avouris, P. *Phys. Rev. Lett.* **2000**, 85, 1958.
- Bai, Y. Z.; Zhao, G. F.; Shen, X. F.; Sun, J. M.; Wang, Y. X. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2011**, 27, 39. [白燕枝, 赵高峰, 沈学锋, 孙建敏, 王渊旭. 物理化学学报, **2011**, 27, 39.]
- Yu, L.; Zheng, G.; He, K. H.; Zeng, Z. L.; Chen, Q. L.; Wang, Q. B. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2010**, 26, 763. [喻力, 郑广, 何开华, 曾中良, 陈琦丽, 王清波. 物理化学学报, **2010**, 26, 763.]
- Long, R.; Dai, Y.; Huang, B. B. *Comput. Mater. Sci.* **2008**, 42, 161.
- Zhang, Z. Z.; Partoens, B.; Chang, K.; Peeters, F. M. *Phys. Rev. B* **2008**, 77, 155201.
- Küwen, F.; Leitsmann, R.; Bechstedt, F. *Phys. Rev. B* **2009**, 80, 045203.
- Liu, Q. H.; Yan, W. S.; Wei, H.; Sun, Z. H.; Pan, Z. Y.; Soldatov, A. V.; Mai, C.; Pei, C. J.; Zhang, X. F.; Jiang, Y.; Wei, S. Q. *Phys. Rev. B* **2008**, 77, 245211.
- Leitsmann, R.; Panse, C.; Küwen, F.; Bechstedt, F. *Phys. Rev. B* **2009**, 80, 104412.
- Leitsmann, R.; Küwen, F.; Radl, C.; Panse, C.; Bechstedt, F. *J. Chem. Theory Comput.* **2010**, 6 (2), 353.
- Ma, L.; Zhao, J. J.; Wang, J. G.; Wang, B. L.; Wang, G. G. *Phys. Rev. B* **2007**, 75, 045312.
- Peelaers, H.; Partoens, B.; Peelaers, F. M. *Nano Lett.* **2006**, 6, 2781.
- Singh, A. K.; Kumar, V.; Kote, R.; Kawazoe, Y. *Nano Lett.* **2006**, 6, 920.
- Fernandez-Serra, M. V.; Adessi, C. H.; Blase, X. *Phys. Rev. Lett.* **2006**, 96, 166805.
- Giorgi, G.; Cartoixa, X.; Sgamellotti, A.; Rurali, R. *Phys. Rev. B* **2008**, 78, 115327.
- Durgun, E.; Akman, N.; Ataca, C.; Ciraci, S. *Phys. Rev. B* **2007**, 76, 245323.
- Durgun, E.; Akman, N.; Ciraci, S. *Phys. Rev. B* **2008**, 78, 195116.
- Xu, Q.; Li, J. B.; Li, S. S.; Xia, J. B. *J. Appl. Phys.* **2008**, 104, 084307.
- Liang, W. H.; Ding, X. C.; Chu, L. Z.; Deng, Z. C.; Guo, J. X.; Wu, Z. H.; Wang, Y. L. *Acta Phys. Sin.* **2010**, 59, 8071. [梁伟华, 丁学成, 褚立志, 邓泽超, 郭建新, 吴转花, 王英龙. 物理学报, **2010**, 59, 8071.]
- Laboratory of Semiconductor Physics, Department of Physics, Xiamen University. *Technological Fundamentals of Semiconductor Device*; People's Education Press: Beijing, 1979; pp 91–95. [厦门大学物理系半导体物理研究室. 半导体器件工艺原理. 北京: 人民教育出版社, 1979: 91–95.]