

## 压力对四方 CuGaSe 结构、电子和力学性能的影响

**摘要**采用第一性原理方法研究了在 0 ~ 10 GPa 压力范围内，四方黄铜矿相 CuGaSe<sub>2</sub> 的结构、弹性、力学、电子和光学特性。结果表明，计算得到的晶格常数、弹性常数和带隙与实验结果和其他环境压力下的计算结果吻合较好。同时，研究了 CuGaSe<sub>2</sub> 的能带结构、态密度和偏态密度与压力的关系。根据我们的工作，我们发现 CuGaSe<sub>2</sub> 的光学性质随着压力的增加而发生蓝移。

**关键词:**电子结构，密度泛函理论，CuGaSe<sub>2</sub>

**DOI:** 10.1134 /  
S0036024423050291

### 介绍

三元黄铜矿半导体化合物二硒化铜镓 CuGaSe<sub>2</sub> 具有吸收系数高、结构缺陷容受性强、能带隙(1.63 eV)与太阳光谱能量匹配良好等优异性能，略高于太阳能电池最佳转换效率范围，是光伏器件的候选材料之一[1-4]。因此，更精确地了解这种材料的光电特性对于设计和制造新的电子和电光器件仍然是必不可少的[5,6]。

在过去的二十年中，压力作为温度外部刺激的替代方案已被证明是改变功能材料结构和物理性质的有效工具。Gonzalez 和 Rincón 对 CuGaSe<sub>2</sub> up 高压相至 20 GPa 进行了研究，发现这种结构相变发生在 13.6 GPa 时，体积崩塌率为 13% [7]。Xue 等人基于密度泛函理论对光伏材料 CuGaSe<sub>2</sub> up 进行了 100 GPa 的实验，阐明了其可能的结构相变和电子性能 [8]。Tinoco 等人使用同步辐射在金刚石砧细胞能量色散 x 射线衍射(EDX)中研究了 CuGaSe<sub>2</sub> up 至 33 GPa [9]。在高压下，cugases<sub>2</sub> 会改变结构，增强其光吸收系数和带隙，间接影响其光伏应用 [10]。在

此外，黄铜矿半导体具有相对狭窄的能隙，压力引起的能隙和电子价态的变化也引起了广泛的研究兴趣。最近，Maeda 和 Wada 等人通过对 CuInSe<sub>22</sub>、CuGaSe<sub>2</sub> 和 CuAlSe 的研究，得出 III-VI 键的 sp 键主导导带，键长越短，带隙越宽 [11]。Vidal 等人利用 GW 和杂化泛函研究了 CuInSe<sub>2</sub> by 的电子性质 [12]。他们发现，黄铜矿相的带隙强烈依赖于晶格位移。此外，众所周知，材料的光学性质在很大程度上依赖于它们的电子结构 [13]。从基本的角度来看，这种材料具有 Cu 的 3d 核心电子和 Ga 的 4d 核心电子与其价带顶部重叠(并因此杂化)的性质，从而产生了许多有趣的异常，涉及负自旋轨道分裂和能隙随温度的非单调行为 [14,15]。这些发现对进一步开发 CuGaSe 的潜在理化性质具有重要的指导意义。在这项工作中，我们描述了 cugas 几何，结构，电子能带结构和光学性质高达 10 GPa 的压力依赖性。提供了压力下晶格参数、能带结构、总态密度(DOS)和偏态密度(PDOS)的信息。同时，计算了复介电函数、吸收系数、反射率、折射率和消光系数。的

表 1. 计算了零压力下六方 CuGaSe2 的晶格参数和带隙

Method	$a_0 = b_0, \text{\AA}$	$c_0, \text{\AA}$	$V, \text{\AA}^3$	Bandgap, eV
This work	5.622	11.146	352.31	1.12
LDA	5.501	10.931	330.78	—
Exp. [33]	5.619	11.026	348.14	1.63
Cal. [23]	5.685	11.220	—	—

本研究的目的是研究四方结构中  $\text{CuGaSe}_2$  的性质，重点研究它们对静水压力的依赖性。我们相信上述结果有助于为黄铜矿半导体的实验和应用提供理论基础。

计算的细节

利用 VASP 软件包计算了高压条件下四方黄铜矿  $\text{Cu}_2\text{GaSe}_2$  相的基本物理性质。Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 被设计用来处理交换相关泛函[16-18]。需要投影增强波(PAW)方法来表示电子和离子之间的相互作用。Cu、Ga 和 Se 原子的价电子分别为  $3d^4s^1$ 、 $3d^14^1s^4p^2$  和  $4^1s^4p$ 。平面波基的动能截止值设为 750 eV，总能量的收敛性优于  $5 \times 10^{-6}$  eV/原子。布里渊区

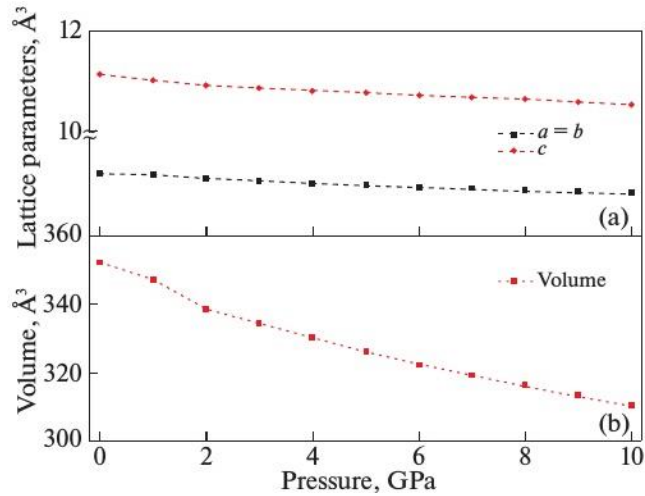


图 1 所示。CuGaSe2 的晶格常数和胞体体积随压力的函数。

使用  $5 \times 5 \times 6$  的 Monkhorst-Pack 网格进行积分。最大力、最大应力和 SCF 迭代的收敛准则分别为 0.01 V/Å、0.02 GPa 和  $5 \times 10^{-6}$  eV/原子。

结果与讨论  
结构特性

从 Tinoco 等人的研究中，得到了 13 GPa 下四方黄铜矿相  $\text{CuGaSe}_2$  的空间群数为 122 (I4 2d)，属于四方体系[9]。在此基础上，采用第一性原理计算优化了 0-10 GPa 压力下 I4 2d-  $\text{CuGaSe}_2$  的结构。表 1 总结了在 0 GPa 下 I4 2d-  $\text{CuGaSe}_2$  的平衡晶格参数、体积和键长。根据我们的计算， $\text{CuGaSe}_2$  在零压优化后的结构常数为  $a = b = 5.622 \text{ \AA}$ ， $c = 11.146 \text{ \AA}$ ，之前得到的实验值为  $a = b = 5.619 \text{ \AA}$ ， $c = 11.026 \text{ \AA}$  [19]。对比表明，我们的计算结果与现有数据非常接近，目前的数值  $a$  和  $c$  与实验值的偏差在 1% 以内。由此可见，我们的结果与以往的实验和理论数据有很大的一致性。这些迹象表明我们的计算是可靠的。此外，我们还可以在图 1 中看到优化后的晶格参数与外部压力的关系。从图中可以明显看出，当压力增大时，晶格常数  $a$  和  $c$  减小，则单位胞的体积变小。压强对晶格常数  $c$  的影响大于晶格常数  $a$ ，说明 I4 2d-  $\text{CuGaSe}_2$  在  $c$  方向上比在  $a$  方向和  $b$  方向上更容易压缩。这种类似的行为在  $\text{CuGaS}$  [20]、 $\text{CuInS}$  [21] 等黄铜矿化合物中也经常观察到。

同时，利用获得的压力-单位胞体体积 ( $P$ - $V$ ) 数据集，通过将数据拟合到 Birch-Murnaghan 状态方程 (EOS) [22] (图 1b)，得到体积模量 (Bulk modulus) 及其压力导数  $B'$ 。在 10 GPa 时，体积压缩  $V/V_0 = 88.08\%$ ，( $V = 310.24 \text{ \AA}^3$ ， $V_0 = 352.21 \text{ \AA}^3$ )。环境压力和温度下的体积模量为  $B_0 = 61.5 \text{ GPa}$ ，其导数为  $B_0' = 5.27$ 。与前人的理论值吻合较好 [23]。体积模量的压力导数是高压物理中具有重要物理意义的参数。因此，施加压力是改变体积模量的位置和分布的有效方法。

原子，并且它能够调整光学性质和电子结构[24]。

弹性性质

众所周知，弹性常数与材料的脆性、延性和机械稳定性等各种基本性能密切相关[25]。而且，本文高压下单晶弹性常数( $C_{ij}$ )的计算方法与文献[26]相同。在此方法中， $G^*_{G0} = \frac{1}{V} \sum_{ij} C_{ij} \epsilon_i \epsilon_j$ ， $G_0$ 为平衡-2rium吉布斯自由能， $V_0$ 为平衡<sub>0</sub>体积， $G$ 为应变吉布斯自由能。应变张量定义为[27]中所示。四方黄铜矿<sub>2</sub>  $cugase$ 相具有6个独立的弹性<sub>2</sub>常数( $C_{11}$ 、 $C_{33}$ 、 $C_{44}$ 、 $C_{66}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{13}$ )[28]。需要6种应变才能获得，如表2所示。我们在零压力下的计算结果与理论数据非常接近[23]，这表明本文PBE计算的弹性常数是可靠的。作为四边形结构[29]，力学稳定性判据为 $C > 0, C > 0, C > 0, C > 0, (C_{11} - C_{12}) > 0, (C_{11} + C_{12} - 2C_{13}) > 0, 11 [2(C_{11} + C_{33} + 4C_{13}) + C_{33} + 4C_{1344}] > 0$ 。66在零压力和10 GPa压力下，计算得到的弹性常数值与著名的波恩准则是一致的。这与四方黄铜矿相<sub>2</sub>  $cugas$ 化合物在所执行的压力极限下力学稳定有关。<sub>2</sub>

随着压力效应的影响，晶格参数和体积变短，导致弹性常数发生变化。对于外压( $P$ )作用下的四方晶体，其力学稳定性可通过以下标准来检验[30]: $C_{11} - P > 0, C - P > 0, C - P_{33} > 0, C - P > 0, C_{44} - P > 0, (C_{11} - C_{12} - 2P) > 0, (C_{11} + C_{33} - 2C_{13}) - 4P > 0, [2(C_{11} + C_{12}) + C_{33} + 4C_{13}] + 3P > 0$ 。在0~10 GPa的较宽压<sub>2</sub>范围内，计算得到的四边形<sub>2</sub>  $cugas$ 的弹性常数如图2所示。从这张图中我们观察到弹性常数随压力增加的线性响应。当压力低于10 GPa时， $cugas_2$ 的弹性常数满足上述所有条件，表明在10 GPa以下，四边形<sub>2</sub>  $cugasei$ 具有机械稳定性。<sub>22</sub>显然，与其他弹性模量相比，粘土对压力的变化更为敏感。<sub>12 13</sub>在四边形体系中，粘土分别沿<sub>a</sub>方向和<sub>c</sub>方向反映抗压性和原子成键特性。<sub>11 33</sub>在0-10 GP<sub>11 a</sub>的压力<sub>33</sub>范<sub>2</sub>围内， $C > C$ 的现象说明<sub>2</sub>  $cugase$ 在<sub>a</sub>和<sub>b</sub>中具有更强的抗压性

表 2. 六方 CuGaSe2 零压下弹性常数计算及其他理论值 [23]

Method	$C_{11}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{66}$	$C_{12}$	$C_{13}$
This work	86.12	87.91	43.3	34.8	53.77	55.46
Cal. [23]	87.3	100.8	37	33.6	54.6	63.8

方向大于<sub>c</sub>方向，这是符合上述分析的。据我们所知，没有给出该化合物弹性常数的压力导数的实验数据。因此，所得结果可作为未来研究的预测。

电子性质

所有与光学性质相关的基本物理性质都被认为强烈依赖于材料的电子能带结构[31]。由于光谱直接来源于带间跃迁，因此对电子结构的准确描述是必要的[32]。为了进一步了解四方黄铜矿相<sub>2</sub>  $cugas_2$ 化合物的物理和电子特性，沿着连接第一布里渊区高对称点的特殊线计算了能带结构。沿着最高对称点<sub>Z</sub>, <sub>a</sub>, <sub>M</sub>, <sub>G</sub>, <sub>R</sub>和<sub>x</sub>的路径进行带结构计算，这些点的内部坐标分别是(0,0,0.5)，(0.5,0.5,0.5)，(0.5,0.5,0)，(0,0,0)，(0,0.5,0.5)和(0,0.5,0)在第一布里渊区。计算<sub>2</sub>了压力对基于GGA + PBE的四方黄铜矿相<sub>2</sub>  $cugase$ 能带的影响，并在图3中进行了描述。

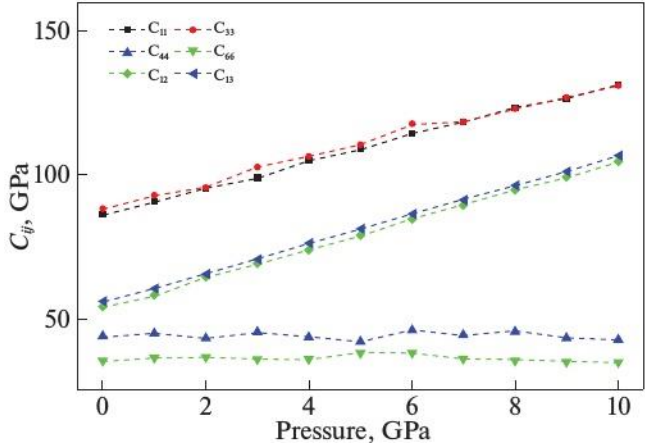


图 2所示。CuGaSe2 的弹性常数随压力的函数。

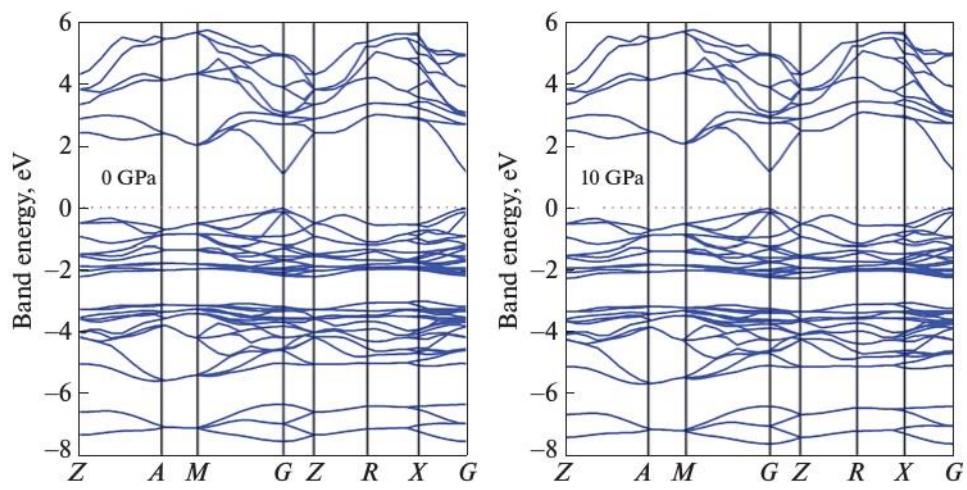


图 3 所示。CuGaSe2 在 0 和 10 GPa 下的能带结构。红色虚线表示费米能级。

在能带结构中，点线表示费米能级。可以注意到，带结构曲线没有穿过费米能级，带隙为 1.12 eV，这表明  $\text{CuGaSe}_2$  是在 0 GPa 压力下的半导体。我们可以看到，导带最小值(CBM)和价带最大值(VBM)都位于高对称性的 G 点，说明具有四方黄铜矿结构的  $\text{CuGaSe}_2$  是一种直接带隙半导体。得到的带隙为 1.12 eV，小于 Gonzalez[33]报道的 1.63 eV 实验数据。因此出现了 DFT 带隙低估的常见问题，这主要是由于局域密度近似和广义梯度近似在计算基态能带时产生了较小的带隙[34,35]。

图 4 所示为零压条件下，计算得到的方形黄铜矿相  $\text{CuGaSe}_2$  的能带结构和 DOS，其中费米能级(虚线)设为 0 eV。DOS 结果表明，CGS 的带隙受 Cu 3d 和 Se4p 态(价带)和 Ga 4s 和 Se4p 态(导带)的控制。这些结果与前人的计算结果一致[8]。但是，随着压力的增大，导能带和价能带分别向低能和高能方向移动。传导带和价带的移动导致带隙减小。带隙的压力依赖性如图 5 所示，清楚地表明带隙随着压力的增加而扩大。这一结果可以用压缩时原子之间的距离缩短来解释，从而导致相互作用势的变化。为了确定压力系数，我们拟合了直接带隙来确定压力系数，我们拟合了直接带隙

( $E_g(P)$ )用二次函数  $E_g(P) = E_g(0) + aP + bP^2$ ，得到  $a = 0.049 \text{ eV/GPa}$  和  $b = 2.56 \times 10^{-4} \text{ eV/(GPa)}^2$ 。这里能隙的增加速率是  $\frac{dE_g}{dP} = 46.4 \text{ meV/GPa}$ ，com-

$$dp$$

与光学吸收实验 7 计算的 50 meV/GPa 和其他人计算的 51 meV/GPa 进行比较[36]。

光学性质

本文给出了  $\text{CuGaSe}_2$  的压强相关光学函数，有助于更好地理解其电子结构。迄今为止，关于  $\text{CuGaSe}_2$  的压力相关光学性质的理论研究还很少见。固体宏观光学响应和辐射的传播行为表征为介电函数  $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ ，它与电子与光子的相互作用有关，反映了能带结构等光谱信息。由于虚部  $\epsilon_2(\omega)$  是光学固有束缚的总称，我们使用以下公式计算  $\text{CuGaSe}_2$  的  $\epsilon_2(\omega)$ ：

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{2e^2\pi}{\Omega\epsilon_0} \sum_{k,v,c} \left| \langle \psi_k^c | \hat{u} \times r | \psi_k^v \rangle \right|^2 \delta(E_k^c - E_k^v - E), \quad (1)$$

其中上标  $c$  和  $v$  分别表示导带和价带; $U'$  为入射光场的电场矢量。



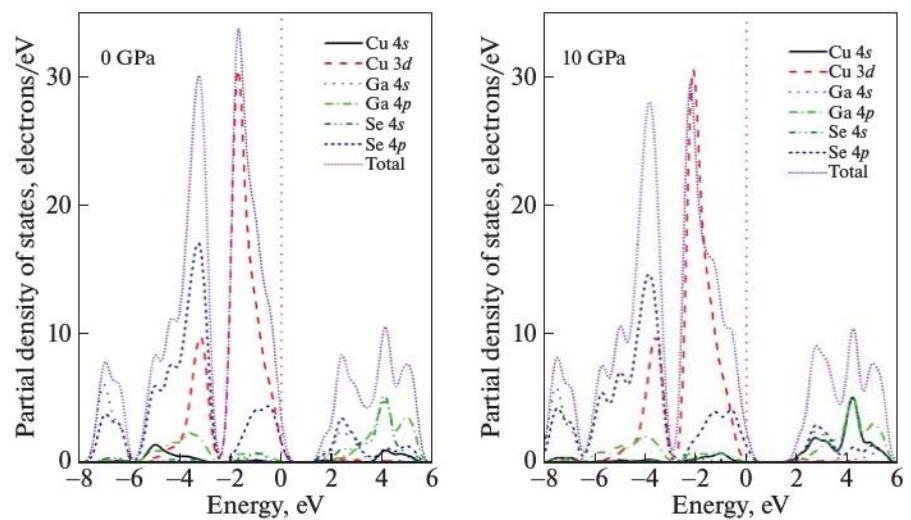


图 4 所示。CuGaSe2 在 0 和 10 GPa 下的总态密度和偏态密度。

实部  $\epsilon_1(\omega)$  由 Kramers - Kronig 关系计算得出：

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} p \int_0^{\infty} \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega', \tag{2}$$

其中  $p$  表示积分的主值。式(1)和(2)表明  $\epsilon_1(\omega)$  和  $\epsilon_2(\omega)$  是入射光的响应。

在不同压力值下介电常数的实部和虚部如图 6 所示。从图 6a 的结果可以看出，当压力从 0 到 10 GPa 变化时，静态介电常数  $\epsilon_1(0)$  从 8.33 减小到 7.57。实部随能量的增加而增大，在 0、5 和 10 GPa 时分别在 1.99、2.28 和 2.47 eV 处达到最大值。有趣的是，从图 6a 中还可以看出， $\epsilon_1(\omega)$  值在半导体特性的 5.96-14.57 eV 能量范围内为正，而在 6.95 和 8.53 eV 附近有两个宽峰低于零。态密度表明，这种现象是由 Se 原子的 4p 轨道和 Ga 原子的 4s 轨道之间的电子跃迁引起的。虚部在材料的光谱中起着启发作用。虚部关系到能带结构，描述了介质的吸收行为，对介质的吸收有深远的影响。在不同压力下，虚部峰值分别出现在 2.23、2.37 和 2.76 eV 处，代表 cugasin 在 2.08 ~ 7.63 eV 能量范围内的最强吸收特性，如图 5b 所示。

介电函数的知识有助于计算所有其他光学性质，如光学常数。光学常数在设计光学器件时很重要。我们用下面三个公式来

计算光学常数:吸收系数( $\alpha(\omega)$ )、反射率( $R(\omega)$ )、折射率( $n(\omega)$ )和消光系数( $k(\omega)$ ) [37,38]:

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2} \left[ \sqrt{\epsilon_1(\omega)^2 + \epsilon_2(\omega)^2} - \epsilon_1(\omega) \right]^{1/2}, \tag{3}$$

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\epsilon_1(\omega) + j\epsilon_2(\omega)} - 1}{\sqrt{\epsilon_1(\omega) + j\epsilon_2(\omega)} + 1} \right|^2, \tag{4}$$

$$n(\omega) = \left[ \sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} + \epsilon_1(\omega) \right]^{1/2} / \sqrt{2}, \tag{5}$$

$$k(\omega) = \left[ \sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} - \epsilon_1(\omega) \right]^{1/2} / \sqrt{2}. \tag{6}$$

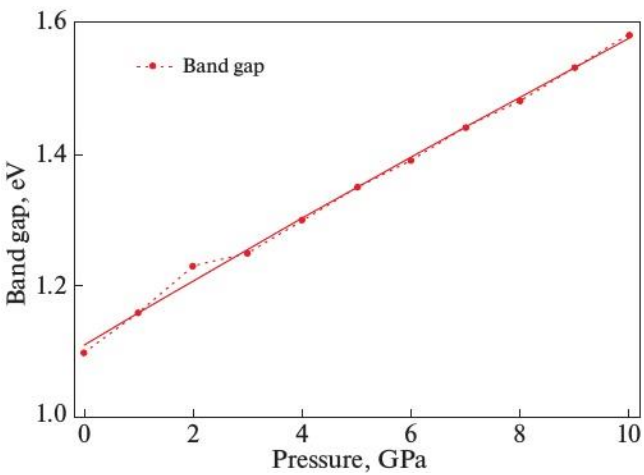


图 5 所示。CuGaSe2 能带隙的压力变化。

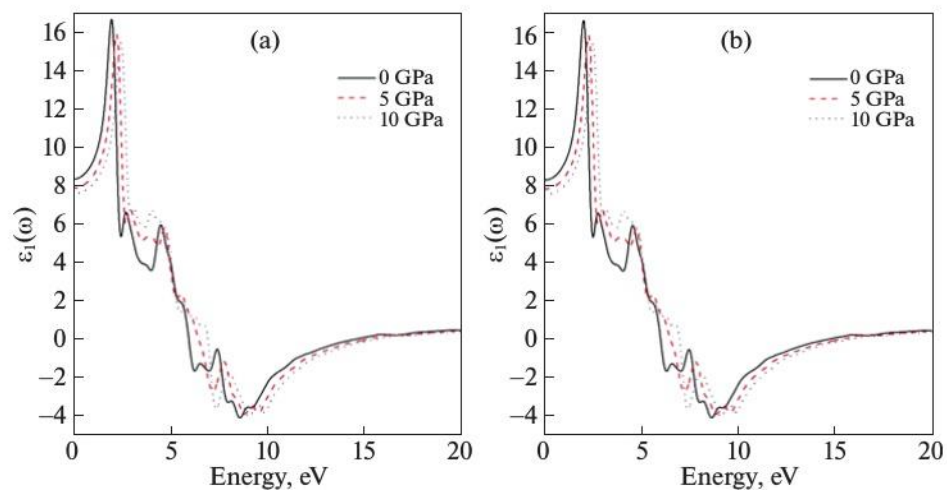


图 6 所示。0、5 GPa 和 20 GPa 时 CuGaSe2 的介电函数:(a)介电函数的实部，(b)介电函数的虚部。

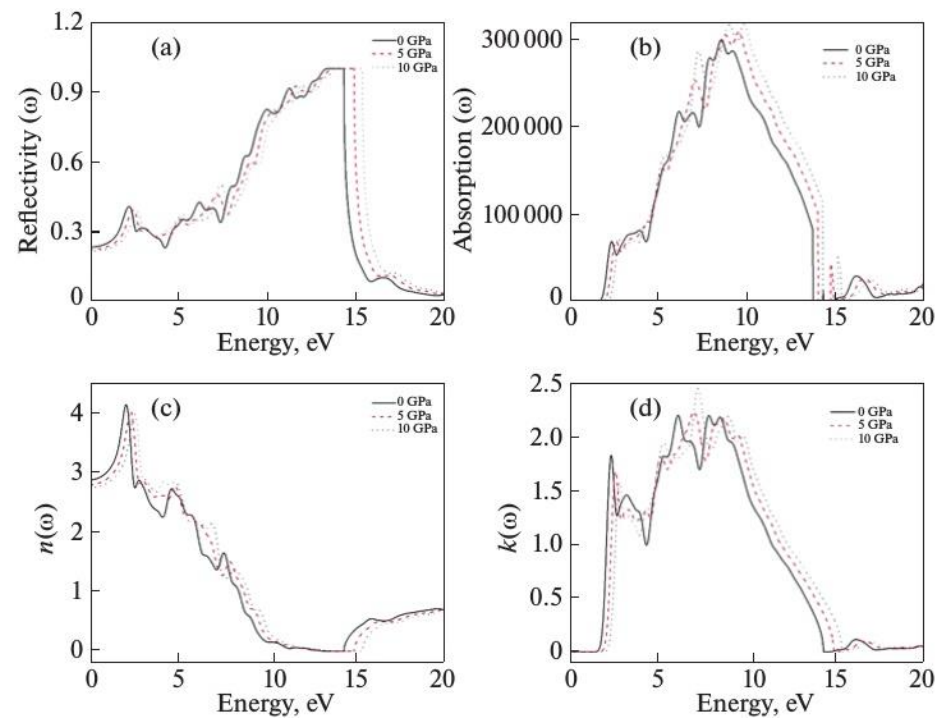


图 7 所示。0、5 和 20 GPa 下 CuGaSe2 的光学性质:(a)反射率;(b)吸收光谱;(c)折射率实部，(d)折射率虚部。

图 7 显示了在 0 ~ 20 eV 光子能量范围为 0、5 和 10 GPa 时的反射率( $R(\omega)$ )、吸收系数( $\alpha(\omega)$ )、折射率( $n(\omega)$ )和消光系数( $k(\omega)$ )。从图 7 中，我们可以看到，随着压力的增加，光学常数的峰值向更高的能量移动，这意味着经历了蓝移。如图 7a 所示，可以发现，反射率的峰值出现在

当 GPa 为 0、5 和 10 时，色散最小的 eV 值分别为 14.25、14.88 和 15.32。值得注意的是，图 7b 中 0 GPa 处的吸收边位于 1.12 eV，对应于 CM 处 Se4p 态与 VM 处 Cu 3d 态之间的电子跃迁所产生的能带隙。当压力增大时，基波吸收边向

由于带隙的增加，高能区。另外， $\text{Cu}_2\text{GaSe}_2$  的光学带隙可以通过以下关系确定： $\alpha = \frac{A(h\nu - E_g)^2}{h\nu}$ ，其中  $A$  为常数， $E_g$  为光学带隙， $h$  为普朗克常数，而  $\nu$  为入射光子的频率[39]。当压力从 0 增加到 10 GPa 时，光学带隙从 1.12 减小到 1.57 eV，这与计算的能带结构一致。

$\text{CuGaSe}_2$  的折射率和消光系数如图 7c 和 7d 所示。 $\text{CuGaSe}_2$  0、5 和 10 GPa 的静态折射率  $n(0)$  分别为 2.87、2.81 和 2.75。可以发现， $n(0)$  的值随着施加压力的增大而减小。当  $\text{CuGaSe}_2$  为 0、5 和 10 GPa 时， $n(\omega)$  分别在 2.08、2.15 和 2.53 eV 附近出现主峰。当  $\text{CuGaSe}_2$  为 0、5 和 10 GPa 时， $k(\omega)$  分别在 6.08、6.98 和 7.28 eV 附近出现主峰。当压力增大时，折射率和消光系数都向高能区偏移，这与吸收系数  $\alpha(\omega)$  和反射率  $R(\omega)$  一致。我们认为，电子结构和光量之间的一致性鼓励我们进一步的实验研究来验证理论发现，重要的是在这种材料中寻找一种可能的光电器件。

结论

综上所述，我们采用第一性原理的方法研究了高达 10 GPa 的黄铜矿半导体  $\text{CuGaSe}_2$  的结构、弹性、力学、电子和光学特性。本文计算的平衡晶格参数和  $\text{Cu}_2\text{GaSe}_2$  的晶格体积与前人的实验和理论结果相比较，发现了很好的一致性。计算得到的晶体弹性常数与已有的理论结果也有较好的一致性。同时，给出了  $\text{CuGaSe}_2$  的电子能带结构、态密度和偏态密度与压力的关系。根据我们的工作，我们发现  $\text{Cu}_2\text{GaSe}_2$  的光学性质随着压力的增加而发生蓝移。结果还表明，带隙随压力增加而增加，这为基础材料物理提供了关于这些黄铜矿半导体在压力下的一些额外信息。

致谢。

部分计算在 CASHIPS 计算科学中心、超级计算中心 ScGrid 和中科院计算机网络信息中心进行。

利益冲突

作者声明他没有利益冲突。

参考文献。

1. H. Strunz, B. H. Geier 和 E. Seliger, Am. 《矿物》 **44**,906(1959)
2. A. Rocket, R. W. Birkmire, J. appll. 物理学, **70**,R80(1991)。
3. J. C. Rife, R. N. Dexter, P. M. Bridenbaugh 和 B. W. Veal, 物理学. Rev. B **16**,4491(1977)
4. C. Parlak 和 R. Eryigit, 物理学. Rev. B **73**, 245217 (2006)
5. 刘凤英, 杨军, 周建林等, 固体薄膜, **52**,2781(2012)
6. M. Belhadj, A. Tadjer, B. Abbar 等, 物理学. Status Solidi **241**, 2516 (2004)
7. J. 冈萨雷斯和 C. Rincón, J. 物理学. 化学. 固体 **51**,1093(1990)
8. 薛洪涛, 唐福林, 卢文杰, 等, 计算. 板牙. Sci. **67**, 21 (2013)
9. T. Tinoco, J. P. iti, A. Polian 等, J.物理学. Iv **4**, c9(1994)。
10. J. E. Jaffe 和 A. Zunger, 物理学. Rev. **29**, 1982 (1984)
11. 前田和和田, 日本 J.阿普尔. 物理学报, **49**,04-dp07(2010)。
12. J. Vidal, S. Botti, P. Olsson 等, 物理学. Rev. Lett. **104**, 056401(2010)。
13. M. Cardona, R. K. Kremer, R. Lauck 等, 物理学. Rev. B **81**, 075207(2010)。
14. 堀中 H., 山本 Y.和宫内 T., Jpn. J.阿普尔. 物理学, **17**,521(1978)。
15. J. Serrano, Ch. Schweitzer, C. T. Lin, 等, 物理学. Rev. B **65**, 125110(2002)。
16. G. Kresse 和 J. Furthmuller, Comput. 板牙. 科学 **6**,15(1996)。
17. H. Monkhorst 和 J. Pack, 物理学. Rev. B **13**, 5188(1976)。
18. j.p.p Perdew 和 A. Zunger, 物理学. Rev. B **23**,5048(1981)。
19. S. C.亚伯拉罕和 J. L.伯恩斯坦, J.化学. 物理学. **61**,1140(1974)。
20. A. H. Romero, M. Cardona, R. K. Kremer 等, 物理学. Rev. B **83**,195208(1983)。
21. J. E. Jaffe 和 A. Zunger, 物理学. Rev. B **28**,5822(1983)。
22. P. Vinet, J. R. Smith, J. Ferrante, J. H. Rose, J.物理学. C **19**, 1467(1986)。
23. A. S. Verma, S. Sharma, R. Bhandari 等, Mater. 化学. 物理学报, **32**,416(2012)。
24. A. J.布兰奇, J. S.昆顿, C. E.莱内汉和 A.普林, 矿. Mag. **72**, 1043(2008)。
25. 焦之, 刘庆军, 刘福生, 唐斌, 物理学. B (Amsterdam, Neth.) **538**, 47(2018).使用本文
26. 物理学:邱少林、马可思. Rev. B **68**, 054103(2003)。
27. 李世生, 周晓峰, 王春华, 等. 合金材料与工程学报, **2014**,32(6):1104 - 1104。
28. 焦之, 刘庆军, 刘福生, 等. 物理学报, **46**,213(2016)。

29. 李建军, 李建军, 李建军, 等。物理学报, **21**(4):551 - 554(2009)。

30.。M. Born 和 K. Huang, *晶体晶格的动力学理论*(克拉伦登, 牛津大学, 1954)。

31. R. Devanathan, N. Yu, K. E. Sickafus 和 M. Nastasi, J. Nucl. Mater. **232,59**(1996)。

32. T. Isobe, K. Daimon, T. Matsubara 和 Y. Hikichi, Ceram. Int. **33**, 1211(2007)。

33. J.冈萨雷斯和 C. Rincón, J.物理学。化学。固体 **51,1093**(1990)。

34. L. J. Sham 和 M. schl 特, 物理学。Rev. Lett. **51,1888**(1983)。

35. A. Munoz 和 K. Kunc, J.物理学。:提供者。物质 **5,6015**(1993)。

36. 物理学:魏少华和曾格。Rev. B **58**, R1710(1998)。

37. 蔡明强, 尹志强, 张明生, 苹果。物理。Lett. **83**, 2805(2003)。

38. S. Saha, T. P. Sinha 和 A. Mookerjee, 物理学家。Rev. B **62**, 8828(2000)。

39. F. 厄巴赫, 物理学家。Rev. **92,1324**(1953)。