

Co-Y 共掺杂 ZnO 光电性质的第一性原理计算

范涛健 袁俊辉 杨永勇 余念念* 王嘉赋*

(武汉理工大学理学院物理系, 武汉 430070)

摘要: 采用基于密度泛函理论 (DFT) 的第一性原理平面波赝势法研究了本征 ZnO、Co 和 Y 单掺杂 ZnO、Co-Y 不同配位共掺杂 ZnO 的电子结构和光学性质。计算结果表明, 在本文的掺杂浓度下, Co 和 Y 单掺杂可以提高 ZnO 的载流子浓度, 从而改善 ZnO 的导电性, Co-Y 共掺时 ZnO 半导体进入简并状态, 呈现金属性。Co 掺杂 ZnO 会在可见光和近紫外区域发生吸收增强现象, 而 Y 掺杂 ZnO 可以提高体系在紫外区域的吸收, 其中由于 Co 离子和 Y 离子之间的协同效应, Co-Y 共掺 ZnO 时体系对可见光和近紫外区域的光子能量吸收大幅增加, 因此 Co-Y 共掺杂 ZnO 可以用于制作光电感应器件。

关键词: ZnO, 第一性原理, 电子结构, 光学性质

中图分类号: O649.4

文献标识码: A

文章编号: 1001-4861(2016)07-1183-07

DOI: 10.11862/CJIC.2016.162

First-Principles Calculations of the Electronic Structure and Optical Properties of Co-Y Co-doped ZnO

FAN Tao-Jian YUAN Jun-Hui YANG Yong-Yong

YU Nian-Nian* WANG Jia-Fu*

(School of Science, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China)

Abstract: The electronic structures and optical properties of intrinsic Co, Y doped and Co-Y co-doped ZnO compounds are calculated using the first principle pseudopotential method of plane wave based on the density functional theory. The results show that the conductivity of ZnO can be improved by Co and Y doping because of the increase in carrier concentration under the order of magnitude of the doping concentration in this paper. Co-Y co-doping leads to degeneration and makes ZnO metallic. Co-doped ZnO can show enhanced light absorption in the visible and near ultraviolet regions, while doping with Y enhances absorption in the ultraviolet region. Co-Y co-doping greatly increases the absorption of visible and near ultraviolet regions because of the synergistic effect between Y ions and Co ions, which can be used to prepare the opto-electronic devices.

Keywords: ZnO; rst-principles; electronic structure; optical properties

0 引言

作为一种新型的宽禁带($E_g=3.37$ eV)化合物半导体材料, ZnO 具有大光电耦合率、低介电常量, 优良的压电、光电特性以及高的化学稳定性, 同时它还

具有高达 60 meV 的激子结合能, 是在紫外和蓝光发射方面很有前途的新型光电子材料^[1-3]。目前很多研究都主要是通过对 ZnO 的元素掺杂使其光电改性进而投入实际应用。例如, ZnO 中添加 Mg, Ga, Al 等元素可以实现对 ZnO 电阻系数的调控, 改善其导

收稿日期: 2016-02-25。收修改稿日期: 2016-05-22。

国家自然科学基金(No.11504281)资助项目。

*通信联系人。E-mail: jasper@whut.edu.cn, niannianyu@whut.edu.cn; Tel: +86-13971473049, +86-15926485056

电性能^[4-6]。在 ZnO 中掺入 Fe, Mn, Ni 等过渡金属原子就能形成稀磁半导体材料^[7-9]。郭少强等^[10]的研究表明 V 掺杂会使 ZnO 体系的最小光学带隙增宽, 同时吸收带边向低能级方向移动。刘玮洁等^[11]研究了不同价态稀土元素 Yb 掺杂 ZnO 的光学性质, 发现掺杂体系的吸收带边发生明显红移并且 Yb²⁺的吸收效果更好。同时 Co、Cu、Y 作为普遍的光学掺杂元素, 其掺杂 ZnO 后对体系的光学性质有明显的改善。包秀丽等^[12]发现 Co 离子的引入会导致 ZnO 吸收谱中出现新的吸收峰, 有蓝移现象发生。文献^[13]采用溶胶-凝胶旋涂法制备了 Co 掺杂 ZnO 薄膜, 观测了不同浓度 Co 样品的 PL 谱, 发现其中出现了较弱的绿光发射和较强的蓝光双峰发射。曲盛薇等^[14]在理论与实验上对 Cu 掺杂 ZnO 做了研究, 发现 Cu 掺杂显著改变了 ZnO 薄膜在近紫外及可见光波段的吸收特性, 其光学带隙随着 Cu 掺杂量的增加有所减小。Heo 等^[15]通过实验发现 Y 掺杂 ZnO 是 n 型掺杂, 掺杂后会减小体系的电阻率, 增强导电性; Zheng 等^[16]发现在与纯氧化锌纳米颗粒相比适量浓度的 Y 掺杂氧化锌在紫外区域的发射谱会有极大的增强。另外, 在 Cu-Co 共掺 ZnO 与 Cu-Y 共掺 ZnO 体系中, 也会由于协同效应而表现出吸引人的性质。吴定才等^[17]用凝胶法制备了 Cu-Co 共掺杂的 ZnO 薄膜, 发现 Cu、Co 掺杂会通过对 ZnO 薄膜中锌空位、锌填隙和氧空位等缺陷的影响实现对样品蓝光-绿光发光带强度的调节。何静芳等^[18]则通过计算发现 Cu-Co 共掺杂 ZnO 对太阳光的吸收大幅增加是来源于

Cu 和 Co 离子间的协同效应。Anandan 等^[19]采用溶胶-凝胶方法制备了不同浓度的 Y-Cu 共掺杂 ZnO 材料并研究了其光学吸收, 发现共掺体系对可见光和近紫外区域的光子能量吸收大幅增加, 在光电感应器件的制作方面具有广阔的应用前景; 而袁俊辉等^[3]则基于第一性原理计算从理论上研究了 Y-Cu 共掺杂 ZnO 后体系光学性质改变的本质, 为今后的实验提供了理论支撑。Co 和 Cu 的光学性质有相似性, 而且 Co³⁺与 Cu²⁺的离子半径接近 (0.72 nm, 0.73 nm), 因此研究 Y-Co 不同配位共掺杂 ZnO 的电子结构和光学性质对于寻找新型光学材料具有重要意义。

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波赝势法, 研究了 Co 和 Y 共掺杂 ZnO 的电子结构和光学性质, 并与本征 ZnO、Co 掺杂 ZnO 和 Y 掺杂 ZnO 的结果进行了对比分析, 希望可为制备高掺杂特性 ZnO 提供一定的理论支撑。

1 计算方法

ZnO 有两种晶体结构, 本文采用更为稳定的六方纤锌矿结构, 空间群为 $P6_3mc$, 其晶胞由 O 的六角密堆积和 Zn 的六角密堆积在 c 轴方向反嵌套而成, ZnO 晶格常数的实验值 $a=b=0.324\ 9\ \text{nm}$, $c=0.520\ 6\ \text{nm}$, $c/a=1.602$ 。计算中我们建立了包含 32 个原子的 $2\times 2\times 2$ 的 ZnO 超胞。晶胞掺杂方式是 Y、Co 原子替换 ZnO 超胞中的 Zn 原子。文献^[12]中研究了 Co 单掺杂浓度分别为 6.25%、12.5%、25% 的掺杂 ZnO 结构。

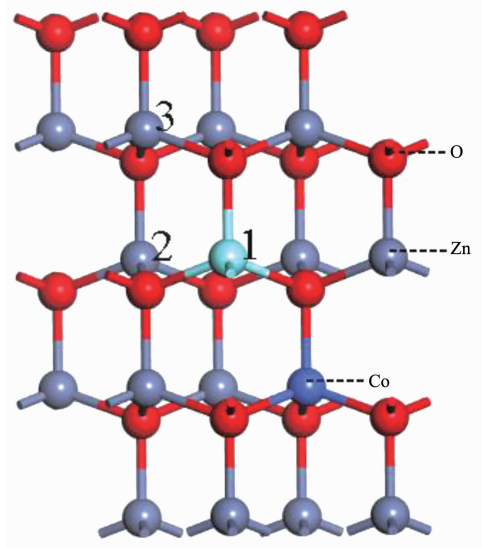


图 1 Co-Y 共掺杂 ZnO 的 $(2\times 2\times 2)$ 超晶胞模型

Fig.1 Model of Co-Y co-doped ZnO supercell

袁俊辉等^[3]研究了掺杂浓度为 6.25% 的 Y 单掺杂 ZnO。本文采用单掺杂时形成浓度为 6.25%(原子分数)的掺杂 ZnO 结构,在计算之前首先对不同元素掺杂的 ZnO 进行几何优化,共掺杂 ZnO 超晶胞模型如图 1 所示,此时形成浓度为 12.5% 的共掺杂 ZnO 结构,其中选取了 Co 和 Y 的 3 种配位进行了对比计算,分别为近邻(1),次近邻(2)及远邻(3)。

本文所有的计算工作都是由基于密度泛函理论(DFT)的 CASTEP 软件包完成。对电子结构进行计算时采用的是平面波赝势方法,用广义梯度近似(GGA)的 PBE 泛函处理电子间的交换关联能,选取的价电子组态分别为: $\text{Zn}3d^{10}4s^2$ 、 $\text{O}2s^22p^4$ 、 $\text{Co}3d^74s^2$ 、 $\text{Y}4s^24p^64d^1$ 。采用 $4 \times 4 \times 2$ 的 Monkhorst-Pack 特殊 K 点对布里渊区积分,能量计算都在倒易空间中进行,平面波截断能为 $E_{\text{cut}}=400$ eV。自洽场计算中,体系能量的收敛精度为 1.0×10^{-5} eV/atom,内应力收敛精度为 0.05 GPa,作用在每个原子上的受力不大于 $0.03 \text{ eV} \cdot \text{nm}^{-1}$,原子最大位移收敛标准为 0.001 nm。在计算之前,先对晶胞结构进行了优化以提高计算精确度。

2 结果与讨论

2.1 晶体结构

掺杂前后 ZnO 超晶胞几何优化后的计算结果

如表 1 所示。本征 ZnO 超胞在优化后晶格常数 a 和 c 分别为 0.665 和 1.059 nm,与袁俊辉等^[3]的计算结果相符。在 Co 单掺入 ZnO 后晶胞参数和晶胞体积有小幅度的减小,而 Y 单掺入 ZnO 会使晶胞参数和晶胞体积较之本征 ZnO 略有增大,在 Co-Y 共掺杂 ZnO 时,晶胞参数和晶胞体积都比本征时略大,处于 Co 和 Y 单掺时两者之间,出现这种结果的原因是 Y^{3+} 、 Zn^{2+} 和 Co^{3+} 离子半径的不同($0.09 \text{ nm} > 0.074 \text{ nm} > 0.072 \text{ nm}$)。

表 2 为优化后 ZnO 各原子间的重叠集居数,其中已有部分数据取平均值。由表 2 可知,对于本征 ZnO, Zn 原子和 O 原子之间为极性共价键。掺杂使体系的电荷重新分配,可以发现掺杂原子对周围原子的成键有很大影响。从表 2 可以看出,对整个超晶胞求平均后掺杂体系的 Zn-O 键的布居数有所减小。由于晶体的各向异性,Co 和 Y 替换 Zn 后与周围的 O 发生作用,在不同方向上成键的强弱不同。掺杂体系中,Co-O 键和 Y-O 键与 Zn-O 键相比,在平行于 c 轴的方向上,集居数变小,成键的共价性减弱,离子性增强;在垂直于 c 轴的方向上,集居增加,成键的共价性增强。与单掺杂体系相比,Co-Y 共掺杂后,Co 原子的集居数变小,Co-O 键离子性增加,说明 Y 的掺入减小了 Co 周围的电子云密度,对 Co 离子具有氧化作用。

表 1 本征和掺杂 ZnO 超晶胞优化后的晶格参数

Table 1 Optimized lattice constants of intrinsic and doped ZnO supercell

Configuration	a / nm	c / nm	c / a	V / nm^3
ZnO	0.656 3	1.059 0	1.613	0.3951 19
ZnO-Co	0.656 2	1.059 0	1.614	0.3949 47
ZnO-Y	0.664 9	1.067 9	1.606	0.4090 23
ZnO-Co-Y(1)	0.661 3	1.068 9	1.616	0.4043 39
ZnO-Co-Y(2)	0.664 7	1.065 4	1.603	0.4074 74
ZnO-Co-Y(3)	0.664 2	1.065 1	1.604	0.4075 39

表 2 优化后本征和掺杂 ZnO 各原子间的 Mulliken 重叠集居数

Table 2 Mulliken bound populations of intrinsic and doped ZnO after optimization

Model	ZnO	ZnO-Co	ZnO-Y	ZnO-Co-Y ¹	ZnO-Co-Y ²	ZnO-Co-Y ³
Zn-O(II)	0.43	0.42	0.41	0.40	0.37	0.37
Zn-O($\perp$)	0.39	0.38	0.36	0.37	0.37	0.34
Co-O(II)	—	0.38	—	0.33	0.32	0.29
Co-O($\perp$)	—	0.42	—	0.36	0.38	0.38
Y-O(II)	—	—	0.42	0.37	0.42	0.42
Y-O($\perp$)	—	—	0.46	0.46	0.46	0.46

2.2 能带结构与态密度分析

图 2 对比考察了掺杂前后 ZnO 的能带结构,图中只给出了费米能级(0 eV 处为费米能级)附近(-4~4 eV)的能带结构,以便更加清晰。从图 2 可以看出,对于本征 ZnO,价带顶和导带底都位于 G 点处,说明 ZnO 为直接带隙半导体,禁带宽度 $E_g=0.73$ eV。此计算结果与文献^[18]得到的结果完全一致,但比实验值 ($E_g=3.37$ eV) 偏低。这主要是广义梯度近似(GGA)存在 E_g 计算值偏低的普遍性问题所致^[3]。对于本文计算的本征 ZnO 结构,由于 Zn3d 态的能量被过高估计,使得其与 O2p 态之间的相互作用增强,以致于价带带宽增大,所以计算得到的 ZnO 带隙宽度偏低。我们更关心的是掺杂带来的变化的趋势及其机理。从图 2(b)可以看出,与未掺杂 ZnO 相比,掺入 Co 后,会在导带底引入杂质能级,同时在禁带中也出现了杂质能带,费米能级上移,是 n 型掺杂。从

图 2(c)可以看出,与未掺杂 ZnO 相比,掺入 Y 后,带隙略有减小,费米能级上移进入导带,导带电子浓度增加属于 n 型掺杂。Co-Y 共掺后,导带与部分杂质能级相连,费米能级处的能带结构更加的丰富。其原因是相对于单掺杂情况,共掺杂时的协同效应会使 Co 离子和 Y 离子出现更多的价态,费米能级进入导带,半导体发生简并的同时呈现金属性。

图 3 为计算所得本征及 Co、Y 单原子掺杂和 Co-Y 共掺 ZnO 的总态密度(TDOS)图和分波态密度(PDOS)图。从图 3(a)中可以看出,对于本征 ZnO,其导带部分主要是由 Zn4s 态提供,而-6~0 eV 的价带则是由 Zn3d 态和 O2p 态轨道杂化形成,在-18~16 eV 处还存在由 O2s 态形成的孤立能带。从图 3(b)中可以看出,与本征 ZnO 比较,单掺杂 Co 时,一部分 Co3d 态与 O2p 态和 Zn3d 态共同构成价带,增加了价带的电子态密度,另一部分 Co3d 态在禁带

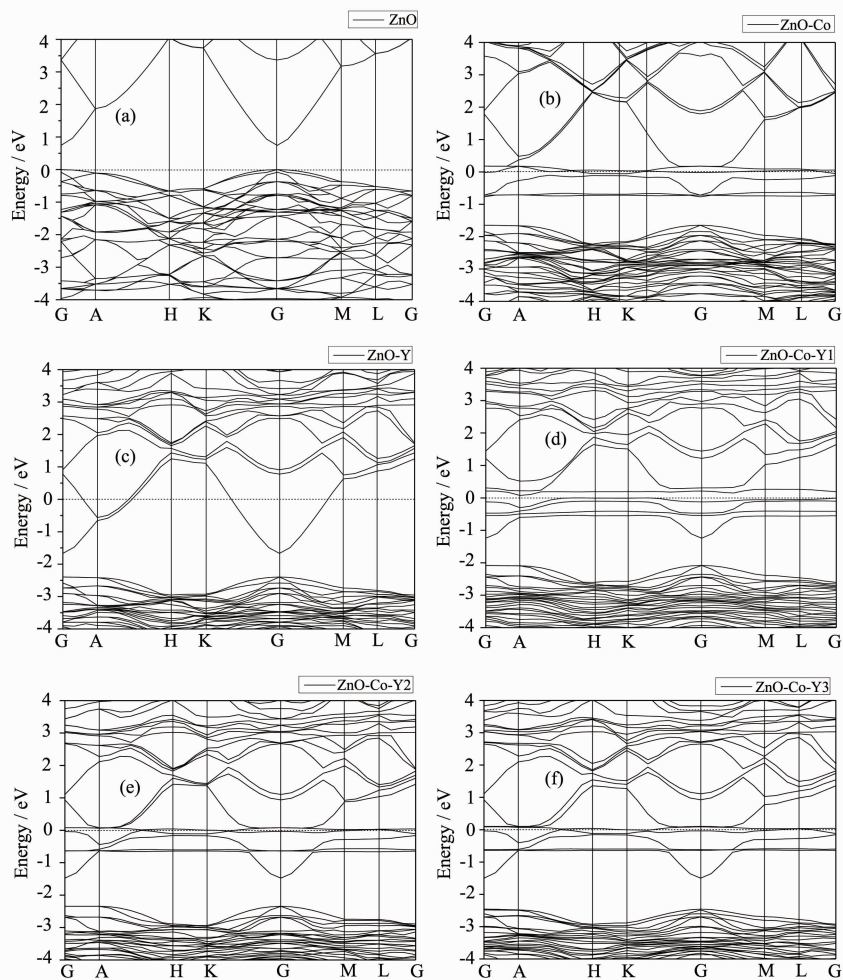


图 2 各 ZnO 体系的能带结构

Fig.2 Energy band structures of every ZnO system

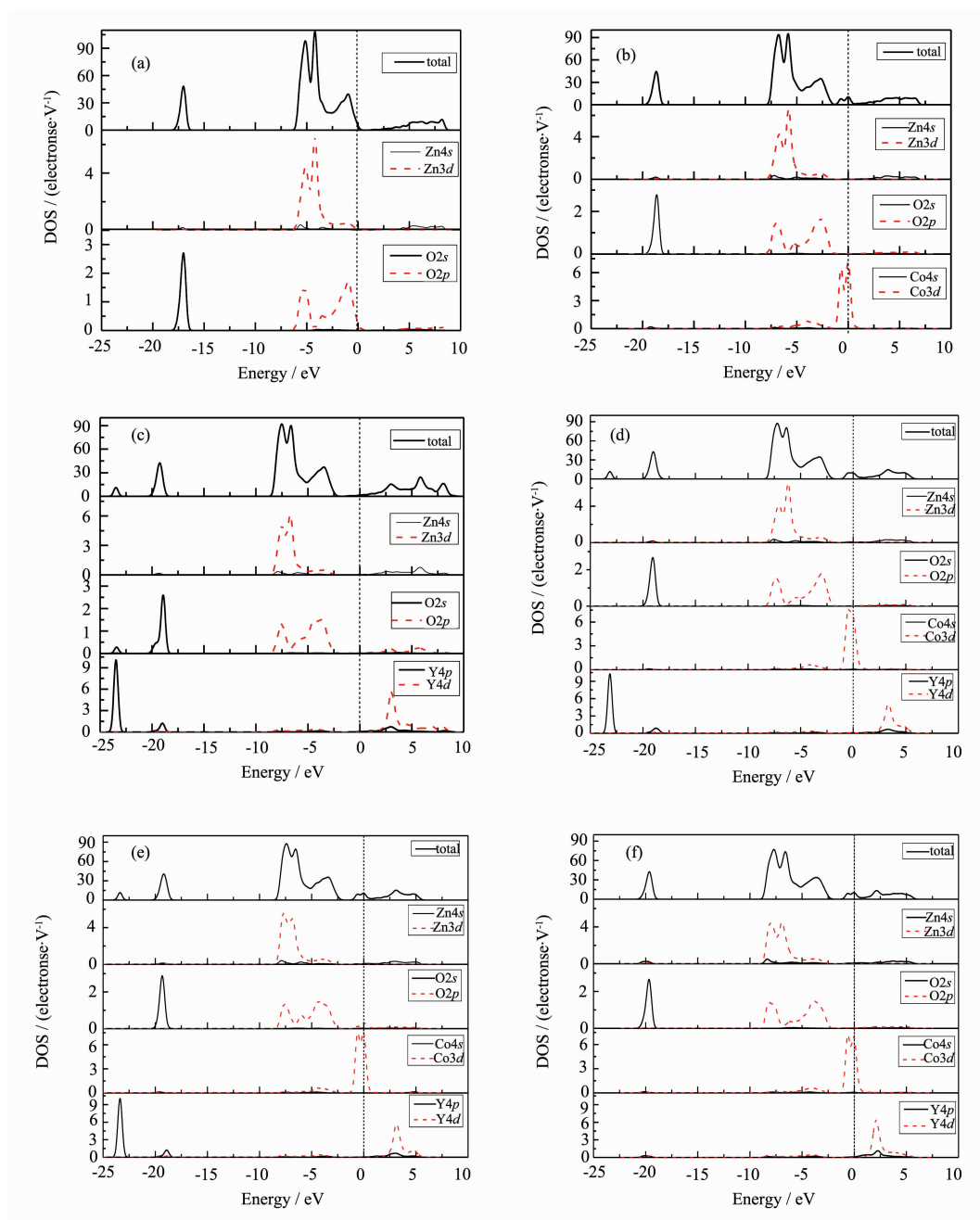


图 3 各 ZnO 体系的态密度
Fig.3 PDOS of every ZnO system

中形成杂质能级,有助于电子从价带到导带的跃迁,增加了 ZnO 的电导率。单掺杂 Y 时在 $-23.8 \sim 23.0$ eV 和 $-19.4 \sim 18.6$ eV 处增加了由 Y4p 态电子形成的能带,而 Y4d 态电子主要在导带的低能级区域有所贡献。图 3(d,e,f)为 3 种配位下 Co-Y 共掺 ZnO 时的态密度图,可以看到在费米能级附近依然存在着强度有所不同的杂质能带,且 Y4d 态和 Y4p 态及 Co3d 态的作用将会导致体系中电子在各量子态之

间的跃迁受到影响。还可以看出,相对于 Co 单掺杂 ZnO,共掺杂体系中 Y 的掺入使 Co 离子在费米能级处的电子态密度有一定的增加。在此处由于无论对 ZnO 晶体的价带还是导带,Y 的 s 轨道电子态密度都只有很小的贡献,并且只作用在更深能级处(< -40 eV),所以在此处可以忽略不计。通过以上分析,过渡金属 Co、Y 替换 Zn 掺杂 ZnO 后会导致能带数目增多,并且对 ZnO 掺杂结构的性质起着主要作用是其

d 态电子。

2.3 光学性质

在第一性原理研究中,材料的光学性质主要是通过介电函数来研究。在线性响应范围内,固体的宏观光学响应函数通常由光的复介电函数 $\epsilon(\omega)$ 进行描述:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (1)$$

其中 $\epsilon_1 = n^2 - k^2$, $\epsilon_2 = 2nk$ 分别为介电函数的实部与虚部, ω 是频率。介电函数的虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 与光学吸收直接相关,它可以由电子跃迁的选择定则,占据态的电子波函数以及未占据态的电子波函数之间的矩阵元计算从而得出。根据 Kramers-Kronig 色散关系和直接跃迁概率的定义可以推导出晶体介电函数的实部 ϵ_1 、虚部 ϵ_2 、吸收系数 $\alpha(\omega)$ 、反射系数 $R(\omega)$ 和能量损失谱 $L(\omega)$ 等。在这里直接给出结果^[18]:

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2} \omega [(\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega))^{1/2} - \epsilon_1(\omega)]^{1/2} \quad (2)$$

$$R(\omega) = \left| \frac{(\epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega))^{1/2} - 1}{(\epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega))^{1/2} + 1} \right|^2 \quad (3)$$

由于密度泛函理论计算所得到的带隙通常会比实验值小,因此本文在计算光学性质时用剪刀算符对带隙进行校正。剪刀算符取 ZnO 禁带宽度的实验值 ($E_g = 3.37$ eV) 与 ZnO 禁带宽度的计算值 ($E_g = 0.74$ eV) 之差 2.63 eV。垂直入射光的极化方向为 $\langle 100 \rangle$ 方向。

图 4 为本征 ZnO 及各掺杂 ZnO 介电函数虚部。从图 4 可以看出,本征 ZnO 的介电谱存在 3 个峰,分别位于 4.4、9.1 和 12.3 eV 处,与文献^[3]计算得到的结果(4.3、9.1、12.6 eV)十分接近。由对 ZnO 的能带结构和分态密度的分析可知,第一个峰主要来源于

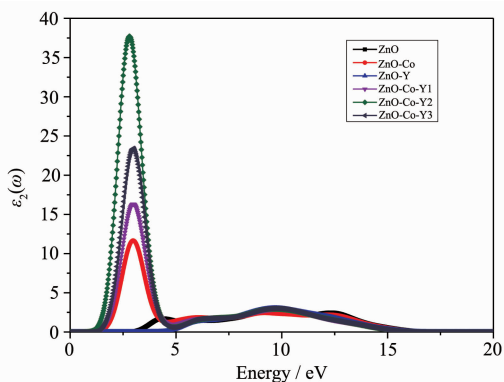


图 4 本征 ZnO 和各掺杂 ZnO 的介电函数虚部

Fig.4 Imaginary part of dielectric function of intrinsic and doped ZnO

价带附近的 $O2p$ 态电子与导带底附近的 $Zn4s$ 态电子之间的跃迁,第二个峰主要是由 $Zn3d$ 态和 $O2p$ 态电子之间的跃迁引起,第三个峰则是由价带中 $Zn3d$ 态和 $O2s$ 态之间的跃迁所致。Co 单掺杂后主要存在 4 个峰,分别位于 3.0、6.1、9.2、12.2 eV 附近,Y 单掺杂后则出现了 3 个峰,分别是在 6.1、9.7、12.5 eV 附近。Co 掺杂主要引入了 $Co3d$ 态电子与 $O2p$ 态电子之间的跃迁,对应 3.0 eV 附近的峰值,而 Y 掺杂则主要引入 $Zn3d$ 态与 $Y4d$ 之间的跃迁,对应 9.7 eV 附近的峰值。在共掺杂体系当中,Co 的离子性更强,因此 3.0 eV 附近的峰值更大,这与前面的重叠集局数分析结果相符。可以发现,ZnO 光学性质受掺杂影响较大的主要是能量较低的区域,而较高能量区域的变化相对而言要小很多。这主要归因于 $Co3d$ 态电子与导带底附近 $O2p$ 态电子之间的跃迁。

图 5 为本征及各掺杂 ZnO 的吸收系数随光子能量变化的曲线,从图 5 中可以看出,在 Y 掺杂 ZnO 后,体系的吸收边出现蓝移,且在高能出现吸收峰,使得 ZnO 在紫外区域的吸收增强,与实验得到的结果相符^[20]。而当 Co 单掺入 ZnO 后,体系的吸收峰则出现明显的红移,使得 ZnO 近紫外区域的吸收边向长波方移动,从图 5 中可以看出,在 Co 单掺入 ZnO 后会使得体系在可见光区域的吸收系数增强,而在 Co-Y 共掺后,低能区域的吸收峰值进一步增加,同时高能区域的吸收峰明显红移并且展宽,这主要是载流子浓度增加导致的^[3]。由上述对态密度的分析可知,共掺体系中 Co 离子在费米能级处的电子态密度会进一步增加,而 $Co3d$ 态电子与 $O2p$ 态电子之间的跃迁恰好增加了可见光区域的光吸收系数。相对于单掺杂体系,Co-Y 共掺杂后对可见光波段的吸收能力有较大的增加,有利于在光电感应器件中的应用。

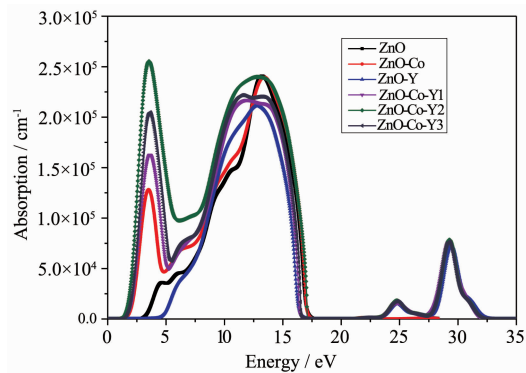


图 5 本征 ZnO 及各掺杂 ZnO 的吸收谱

Fig.5 Absorption spectra of intrinsic and doped ZnO

图6为本征和各掺杂 ZnO 的反射谱。从图6中可以看出,Y 单掺 ZnO 时,体系的反射率与本征 ZnO 相比在 80~250 nm 波段略有增大,其余部分均低于本征 ZnO。在 Co 单掺杂时,体系的反射率在低能方向上明显增强,在 高能方向也略有增强。而在 Co-Y 共掺体系中可以发现对于高能区域和低能区域,反射率都有较大的增强。

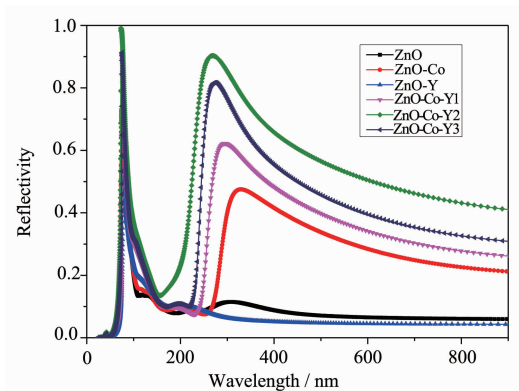


图6 本征 ZnO 及各掺杂 ZnO 的反射谱

Fig.6 Reflectivity spectra of intrinsic and doped ZnO

3 结 论

本文通过第一性原理平面波赝势法建立了本征 ZnO、Co 和 Y 单掺杂 ZnO、Co-Y 不同配位共掺杂 ZnO 的超胞模型,并分别对模型进行了几何结构优化、能带结构分布、态密度分布和光学性质的计算。计算结果表明,掺杂后 ZnO 中平行于 c 轴方向的共价键减弱,垂直于 c 轴方向的共价键增强。与 Co 单掺杂体系相比,Co-Y 共掺杂 ZnO 的 Co 原子的集居数变得更少,表明 Y 的掺入对 Co 离子具有氧化作用;通过对能带图的分析可以发现,在 ZnO 中,单掺 Co 和 Y 都可以提高 ZnO 中载流子浓度,从而提高 ZnO 的导电性。光学计算则表明,在 Co-Y 共掺杂 ZnO 体系中,Y 离子的引入,一方面增强了体系在紫外区域的吸收,另一方面使 $\text{Co}3d$ 态电子在费米能级附近的 2 个电子密度峰距离更近,使得共掺体系的光子能量吸收在可见光区域大幅增加,同时在近紫外区域红移并展宽,因此 Co-Y 共掺杂 ZnO 在光电感应器件和太阳能电池的工业生产中具有广阔的应用前景。

参考文献:

[1] CHEN Xi(陈熙), LI Li(李莉), ZHANG Wen-Zhi(张文治),

et al. *Chinese J. Inorg. Chem.*(无机化学学报), **2015**,**31**(10): 1971-1980

[2] WANG Zi-Fang(王志芳), LI Mi(李密), ZHANG Hong-Xia(张红霞), et al. *Chinese J. Inorg. Chem.*(无机化学学报), **2012**,**28**(4):715-720

[3] YUAN Jun-Hui(袁俊辉), GAO Bo(高博), WANG Wen(汪文), et al. *Acta Phys. -Chim. Sin.*(物理化学学报), **2015**, **31**(7):1302-1308

[4] HE Jing-Fang(何静芳), WU Yi(吴一), SHI Ru-Qian(史茹倩), et al. *Chinese J. Inorg. Chem.*(无机化学学报), **2015**,**31**(1):15-22

[5] GAO Li(高立), ZHANG Jian-Min(张建民). *Acta Phys. Sin.*(物理学报), **2010**,**59**(2):1263-1267

[6] Mass J, Bhattacharya P, Katiyar RS. *Mater. Sci. Eng.*, **2003**, B103:9-15

[7] Limaye M V, Singh S B, Das R, et al. *J. Solid State Chem.*, **2011**,**184**:391-400

[8] Chattopadhyay S, Neogi S K, Sarkar A, et al. *J. Magn. Magn. Mater.*, **2011**,**323**:363-368

[9] XIAO Zhen-Lin(肖振林), SHI Li-Bin(史力斌). *Acta Phys. Sin.*(物理学报), **2011**,**60**(2):027502(8Pages)

[10] GUO Shao-Qiang(郭少强), HOU Qing-Yu(侯清玉), ZHAO Chun-Wang(赵春旺), et al. *Acta Phys. Sin.*(物理学报), **2014**,**63**(10):107101(7Pages)

[11] LIU Wei-Jie(刘玮洁), SUN Zheng-Hao(孙正昊), HUANG Yu-Xin(黄宇欣), et al. *Acta Phys. Sin.*(物理学报), **2013**,**62**(12):127101(7Pages)

[12] BAO Xiu-Li(包秀丽), LIN Lin(林琳). *J. Atom. Mol. Phys.*(原子与分子物理学报), **2015**,**32**(3):487-491

[13] WU Yan-Nan(吴艳南), WU Ding-Cai(吴定才), DENG Si-Hao(邓思浩), et al. *J. Sichuan Normal Univ.*(四川师范大学学报), **2012**,**35**(1):95-100

[14] QU Sheng-Wei(曲盛薇), TANG Xing(唐鑫), LV Hai-Feng(吕海峰), et al. *Chin. J. Lumin.*(发光学报), **2010**,**31**(2): 204-208

[15] Heo S, Sharma S K, Lee S, et al. *Thin Solid Films*, **2014**,558: 27-30

[16] Zheng J H, Song J L, Jiang Q, et al. *Appl. Surf. Sci.*, **2012**,**258**:6735-6738

[17] WU Ding-Cai(吴定才), HU Zhi-Gang(胡志刚), DUAN Man-Yi(段满益), et al. *Acta Phys. Sin.*(物理学报), **2009**,**58**(10): 7261-7266

[18] HE Jing-Fang(何静芳), ZHENG Shu-Kai(郑树凯), ZHOU Peng-Li(周鹏力), et al. *Acta Phys. Sin.*(物理学报), **2014**, **63**(4):046301(7Pages)

[19] Anandan S, Muthukumaran S, Ashokkumar M. *Superlattice Microstruct.* **2014**,**74**:247-260

[20] Anandan S, Muthukumaran S. *Opt. Mater.*, **2013**,**35**:2241-2249