

文章编号: 1000-7032(2018)06-0795-07

Zn_{1-x}Mg_xO 电子结构及光学性质的 第一性原理 GGA + U 方法研究

何 旭^{1,2}, 武莉莉^{1*}, 任胜强¹, 张静全¹, 都 政³

(1. 四川大学 材料科学与工程学院, 四川 成都 610065;

2. 成都纺织高等专科学校, 四川 成都 611731; 3. 国家超级计算深圳中心, 广东 深圳 518055)

摘要: Mg 掺杂 ZnO 形成的固溶体 Zn_{1-x}Mg_xO (ZMO) ($0 \leq x \leq 0.25$) 是一种带隙较宽、电子学性质可调控的半导体材料, 在薄膜太阳能电池及光电设备的透明电极等方面具有重要的应用价值。基于密度泛函理论下的第一性原理超软赝势方法, 采用 GGA + U 计算了 ZMO 的电子结构和光学性质。计算结果表明, 随着 x 值的增加, ZMO 的禁带宽度由 $x=0$ 时的 3.32 eV 增加到 $x=0.25$ 时的 3.78 eV; 光吸收边及反射谱和能量损失谱均发生明显蓝移, 峰值存在于紫外光区。计算结果与实验结论相符合。

关键词: ZMO; 第一性原理; 电子结构; 光学性质

中图分类号: 0471.5; 0472⁺.3

文献标识码: A

DOI: 10.3788/fjxb20183906.0795

First-principles GGA + U Investigation on The Electronic Structure and Optical Properties of Zn_{1-x}Mg_xO

HE Xu^{1,2}, WU Li-li^{1*}, REN Sheng-qiang¹, ZHANG Jing-quan¹, DU Zheng³

(1. College of Materials Science and Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China;

2. Chengdu Textile College, Chengdu 611731, China;

3. National Supercomputing Center in Shenzhen, Shenzhen 518055, China)

* Corresponding Author, E-mail: wulili@scu.edu.cn

Abstract: Mg substitution in ZnO can form ternary alloys Zn_{1-x}Mg_xO (ZMO) ($0 \leq x \leq 0.25$) which has wide band gap and tunable electronic properties. So ZMO has a large application in transparency electrode of thin-film solar cells and optoelectronic device. The electronic structure and optical properties of ZMO ternary alloys were calculated using first-principles calculations based on the density functional theory combined with GGA + U approach. The calculation results show that the doping of magnesium leads to an apparent change of the electronic structure of ZMO. With Mg concentration increasing, the band gap of ZMO widens from 3.32 eV ($x=0$) to 3.78 eV ($x=0.25$). In addition, the absorption edge exhibits a blue shift with Mg concentration increasing. At the same time, the reflectivity and loss-function show mainly in the ultra-violet region, which is similar to those of optical absorption. The calculation results are in good agreement with the experiment.

Key words: ZMO; first-principles; electronic structure; optical properties

收稿日期: 2017-08-02; 修订日期: 2017-09-13

基金项目: 863 国家高技术研究发展计划(2015AA050610)资助项目

Supported by 863 National High Technology Research and Development(2015AA050610)

1 引 言

ZnO 是 II-VI 中典型的直接宽禁带半导体化合物,禁带宽度为 3.37 eV^[1],室温下的激子束缚能高达约 60 meV^[2],常被用来作为光电器件的窗口层^[3],并已在薄膜太阳电池及光电设备的透明电极等方面取得了广泛的应用^[4],近些年来成为国内外研究的热点材料。

材料的能带结构是设计现代光电子器件的关键。通常情况下,掺杂可以有效地调节和改变半导体化合物的能带结构和光学性质。研究表明:Mg 掺杂 ZnO 形成的固溶体 ZMO 是一种新型的半导体光电材料,其禁带宽度具有可调节性^[5]。目前,普遍认为 ZMO 是与 ZnO 构建有效异质结的理想三元体系^[6]。Minemoto 等^[7]用 ZMO 代替 CdS 作为 CIGS 太阳电池的窗口层,通过改变 Mg 在 ZMO 中的含量,使 ZMO/CIGS 形成合适的导带偏移,降低材料界面之间的缺陷复合,以提高太阳电池的光电转换效率。Choi 等^[8]利用磁控溅射方法制备了 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜,并探讨了退火对薄膜结构及光学性质的影响。Kumar 等^[9]近期通过实验发现:ZMO ($0 \leq x \leq 0.3$) 在保持 ZnO 稳定的纤锌矿结构不发生变化的情况下,其带隙值从 $x=0$ 的 3.25 eV 可以增加至 $x=0.3$ 的 4.06 eV。近期,利用第一性原理研究掺杂对纤锌矿结构 ZnO 的电子结构和光学性质影响的文献报道很多^[10-12]。Zhang 等^[13]采用第一性原理下的 GGA 方法计算了 Mg 掺杂 ZnO 所致的禁带宽度增大现象,计算结果认为 Mg 的掺入导致 Zn-4s 态向真空能级偏移是导致禁带宽度增大的根本原因。吴孔平等^[14]利用 GGA + U 方法对纤锌矿结构 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 合金极化特性随 Mg 组分变化的规律进行了研究。

本文基于第一性原理的广义梯度近似 GGA + U 方法,对纤锌矿结构 ZMO ($x=0, 0.0625, 0.125, 0.25$) 合金电子结构和光学性质进行了系统的计算研究,从微观角度对其能带结构变化进行了理论分析,计算结果为实验提供了理论参考。

2 计算模型和方法

2.1 计算模型

ZnO 呈六方纤锌矿结构,计算采用超晶胞模

型,分别为 $ZnO(2 \times 2 \times 2)$; 1 个 Mg 原子取代一个 Zn 原子的 $ZnO(2 \times 2 \times 2)$; 1 个 Mg 原子取代 1 个 Zn 原子的 $ZnO(2 \times 2 \times 1)$ 以及 1 个 Mg 原子取代 1 个 Zn 原子的 $ZnO(1 \times 1 \times 2)$ 。因此, x 的值分别对应于 0, 0.0625, 0.125, 0.25。图 1 给出了含有一个 Mg 原子的 $ZnO(2 \times 2 \times 1)$ 超晶胞模型。对于一个特定的掺杂体系,等价替位掺杂存在多种可能性,不同的掺杂构型计算结果可能不同。然而,晶体结构存在着空间对称性,利用对称性以及周期性平移条件,可以找到合金替位掺杂的不等价构型,对不同的构型进行结构优化,得到最稳定的构像,进行能带结构的计算。

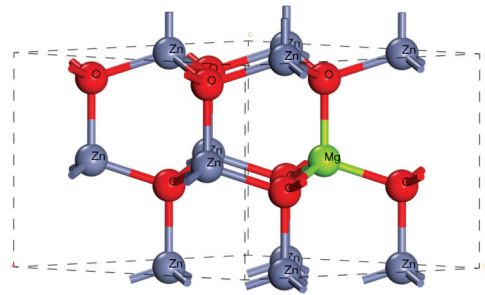


图 1 含有一个 Mg 原子的 $ZnO(2 \times 2 \times 1)$ 超晶胞模型

Fig. 1 Illustration of $2 \times 2 \times 1$ wurtzite bulk material ZnO super cell

2.2 计算方法

本文计算采用的是基于密度泛函理论(DFT)框架下的 CASTEP 软件包^[15]。电子间交换关联能用广义梯度近似的 PBE^[16]泛函描述,电子和离子间的相互作用采用超软赝势,几何优化法采用了 BFGS 算法^[17]。系统总能量和电荷密度在布里渊区的计算使用 Monkhorst-Pack^[18]方案来选择型 k 空间格点,布里渊区 k 点的选取分别为 $4 \times 4 \times 2, 4 \times 4 \times 2, 4 \times 4 \times 4, 4 \times 4 \times 5$, 对应于 x 为 0, 0.0625, 0.125, 0.25 的超晶胞模型。计算在不固定任何参数下进行几何优化,能量、自洽场和能带的收敛精度皆设为 1.0×10^{-5} eV/atom,平面波截断能为 480 eV,原子间的相互作用收敛精度为 0.5 eV/nm。采用 GGA 和 GGA + U 两种方法优化得到晶格参数,见表 1,优化后的晶格常数均比实验值略大,但误差都小于 1.5%,且后者计算所得的结果更接近实验值。由表 1 可知,ZMO 晶格常数 a 值随 x 增大而增大, c 值随 x 增大而减小,变化趋势与实验结果^[5]相一致。

表 1 GGA 和 GGA + U 两种方法结构优化后 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($0 \leq x \leq 0.25$) 合金晶胞参数

Tab. 1 Geometry optimization results of different doped systems of $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($0 \leq x \leq 0.25$)

合金	a/nm			c/nm			V/nm^3	
	GGA	GGA + U	实验值	GGA	GGA + U	实验值	GGA	GGA + U
ZnO	0.328 9	0.327 6	0.325 8 ^[19]	0.529 6	0.527 1	0.522 0 ^[16]	0.049 619	0.048 831
$Zn_{0.9325}Mg_{0.0625}O$	0.329 2	0.328 1	—	0.529 0	0.526 7	—	0.049 699	0.048 882
$Zn_{0.875}Mg_{0.125}O$	0.329 7	0.328 8	—	0.528 5	0.526 3	—	0.049 716	0.048 916
$Zn_{0.75}Mg_{0.25}O$	0.331 4	0.329 4	—	0.528 1	0.525 8	—	0.049 735	0.048 998

3 结果与讨论

3.1 能带结构

图 2 为采用 GGA 和 GGA + U 两种不同的计算方法得到的 ZnO 原胞能带结构图。由图 2 可知, ZnO 价带顶与导带底均处在布里渊区 Γ 点位置, 属于直接带隙半导体。其中, 图 2(a) 是 GGA 方法计算得到的, 由于 GGA 只给出了单粒子的本征值, 对过渡金属氧化物和氮化物等强关联体系进行相关计算时, 存在禁带宽度普遍偏低的问题^[19], 尤其是对强关联体系的能带结构往往不能给出准确的结果^[20]。本文采用 GGA 方法计算得到 ZnO 的带隙值为 0.73 eV, 与 Zhang 等^[13]采用同样计算方法得到的结果接近; 图 2(b) 是 GGA + U 方法计算得到的能带结构图, 参照文献[21]中

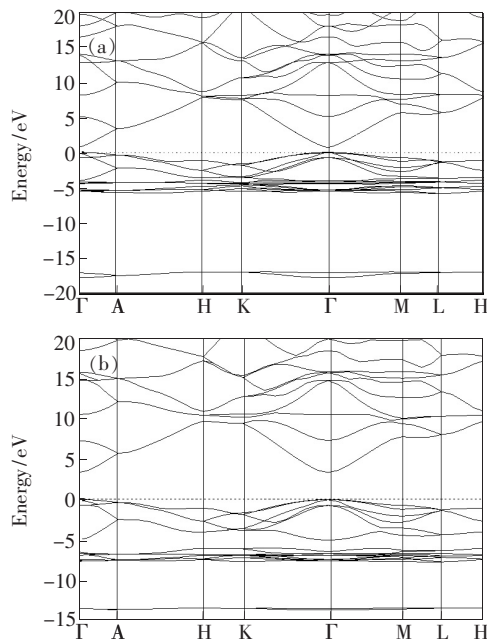


图 2 本征半导体 ZnO 能带结构。(a) GGA 计算结果; (b) GGA + U 计算结果。

Fig. 2 Calculated band structure of pure ZnO. (a) GGA. (b) GGA + U .

对 ZnO 的 Zn-3d 与 O-2p 电子加上的 U 值分别为 $U_d = 10.5$ eV 和 $U_p = 7.0$ eV, 以其修正电子之间的库仑占位势, 计算得到的带隙值为 3.32 eV, 与实验结果相符合^[1]。

采用磁控溅射方法, 我们在室温下制备了含不同 Mg 组分的 ZMO 薄膜, Mg 组分 x 用日本理学 RIGAKU ZSX Primus 型号的 X 射线荧光光谱仪测量得出, 薄膜的透过率由 PerkinElmer 的 Lambda 950 型号的分光光度计测量得到。ZMO 为直接带隙半导体, 根据透过率曲线计算 ZMO 薄膜的吸收系数如图 3(a) 所示, 然后根据公式(1) 做出 Tauc 曲线, 如图 3(b) 所示。

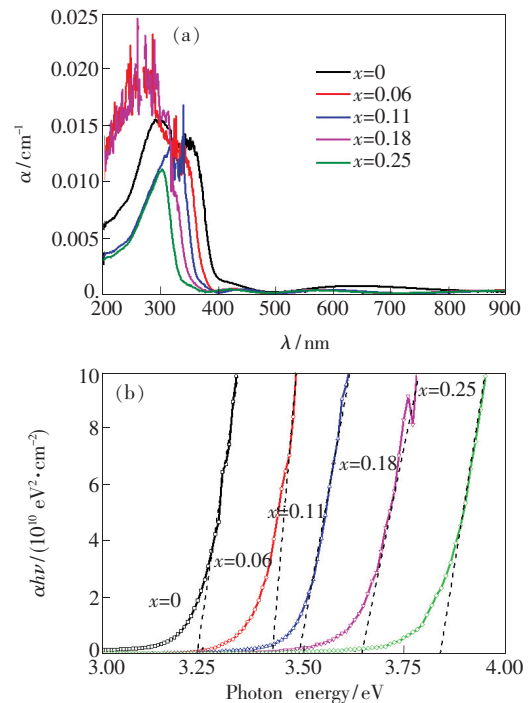


图 3 不同 Mg 含量下的 ZMO 薄膜光吸收谱(a)和光学带隙图(b)

Fig. 3 Absorption spectra (a) and band-gap (b) of ZMO films

$$(\alpha h\nu)^2 = A(h\nu - E_g), \quad (1)$$

其中, α 表示光吸收系数, $h\nu$ 为入射光子能量, h 是普朗克常数, A 是比例系数, E_g 为 ZMO 薄膜的光学禁带宽度。将图 3(b) 中曲线的线性部分延长与横坐标相交, 交点所对应的能量即为 ZMO 薄膜的光学禁带宽度 E_g 。表 2 给出了实验测量得到的不同 x 下 ZMO 薄膜的禁带宽度值及 GGA 和 GGA + U 两种方法计算得到的 ZMO 禁带宽度值。对于真实的体系与环境交换电子, 其能量变换应该是交换前后的两个状态的线性组合, 这样的能量变化应该是线性的, 而 GGA 对部分(非整数的)占据的 Kohn-Sham 轨道的不正确处理导致能量变化是非线性的, 这二者之间的能量差就是

表 2 GGA 和 GGA + U 两种方法及实验测量得到的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($0 \leq x \leq 0.25$) 禁带宽度

Tab. 2 Band gaps of $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($0 \leq x \leq 0.25$) based on GGA and GGA + U

组分 x	GGA E_g /eV	GGA + U E_g /eV	U /eV	实验值 E_g /eV
0	0.73	3.32	$U_{Zn,d} = 10.5$ $U_{O,p} = 7.0$	3.24 ($x=0$)
0.062 5	0.85	3.41	$U_{Zn,d} = 7.0$ $U_{O,p} = 7.0$	3.42 ($x=0.06$)
0.125	1.01	3.45	$U_{Zn,d} = 4.0$ $U_{O,p} = 7.0$	3.49 ($x=0.11$)
0.25	1.25	3.78	$U_{Zn,d} = 3.5$ $U_{O,p} = 7.0$	3.80 ($x=0.25$)

3.2 态密度

图 4 为 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($x=0, 0.062 5, 0.125, 0.25$) 合金的总态密度图 (Total density of state, TDOS) (a) 及 $Zn_{0.875}Mg_{0.125}O$ 分波态密度图 (Partial density of state, PDOS) (CASTEP 中把各自的 Fermi 能级认为是能量零点) (b)。ZMO 中参与成键的电子分别为 Zn 的 3d 4s、O 的 2s 2p 及 Mg 的 2p 3s。由图 4(a) 可知, ZMO 的价带主要由 3 部分组成: 价带顶、价带底和价带中间部分。结合

Hubbard U 能量项的来源。因此, 引入 U 值的目的是为了修正低估能隙问题。参数 U 的确定也不是凭经验, 而是考察 DFT 与真实势能面的差作为依据的。随着 ZMO 中 x 值增加, 即 Zn 浓度降低, Zn-3d 与 O-2p 轨道之间的库伦占位势逐渐减弱, 逐渐减小 Zn-3d 轨道的 U 值, 调节 Zn-3d 与 O-2p 轨道间的库伦占位势, 具体 U 值如表 2 所示。由表 2 可以看出, 计算结果与实验测量值变化结果是一致的, ZMO 能隙值随着 x 的增大而增加, 且 GGA + U 计算得到的结果与实验值更加接近, 文中对 ZMO 态密度及光学性质的讨论均以 GGA + U 计算得到的结果进行。

图 4(b) 分析发现, 价带底 -40 eV 处的态密度峰主要是 Mg-2p 电子贡献; 价带中间部分即 -15 eV 处的态密度主要由 O-2s 电子贡献; 而价带顶主要是 Zn-3d 及 O-2p 电子贡献。导带底主要是 Zn-4s 轨道提供。从图 4(a) 可以看出, 随着 Mg 浓度的增加, -40 eV 处的态密度峰值逐渐增加, 而占据价带顶的 Zn-3d 电子减少, 峰值降低。禁带宽度主要由价带顶的 Zn-3d、O-2p 轨道与导带底 Zn-4s 轨道决定, 随着化合物 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 中 Mg 含量的

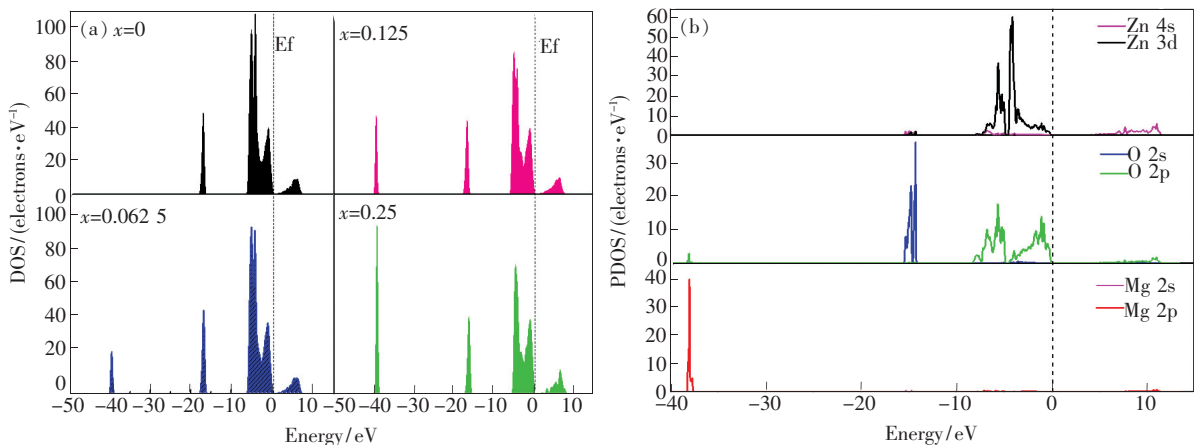


图 4 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($x=0, 0.062 5, 0.125, 0.25$) 的总态密度图 (a) 及 $x=0.125$ 时的分波态密度图 (b)

Fig. 4 TDOS of $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($x=0, 0.062 5, 0.125, 0.25$) (a) and PDOS of $Zn_{0.875}Mg_{0.125}O$ (b)

增加,Zn的4s态电子逐渐减少,费米能级与导带底的距离逐渐增加,因此禁带宽度增加。

3.3 光学性质

半导体材料的光学性质对其在光学器件方面的应用有着非常重要的影响。图5给出了采用GGA + U 计算得的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($0 \leq x \leq 0.25$) 的吸收光谱。由图可知,本征半导体 ZnO 在可见光 (350 ~ 800 nm) 范围内存在一定的光吸收,但随着波长的增加,ZnO 对光的吸收有所减弱,其吸收峰值存在于紫外光区的 200 nm 处。随着 ZMO 中 Mg 含量的不断增加,在可见光范围内的吸收明显降低,光吸收边发生明显蓝移,吸收峰降低,尤其是在波长大于 400 nm 的范围内,吸收系数几乎为 0。计算得到 ZMO 的光吸收曲线与实验得到的光吸收曲线图 3(a) 总体变化趋势是一致的。但从图 3(a) 可以发现,Mg 的掺杂浓度为 0.06 和 0.18 时,吸收峰偏蓝光,而 Mg 的掺杂摩尔分数为 0.11

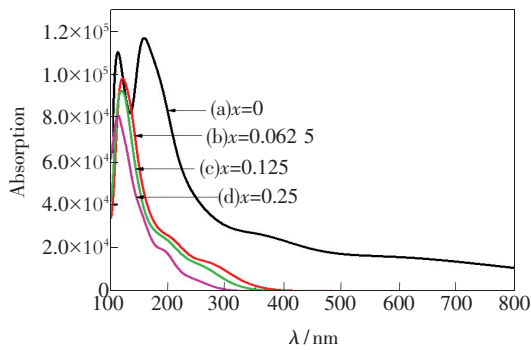


图5 计算所得 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($0 \leq x \leq 0.25$) 合金的吸收曲线

Fig. 5 Absorption spectra of $Zn_{1-x}Mg_xO$ film

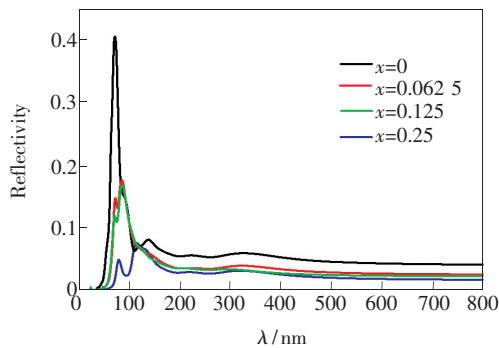


图6 计算所得 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($0 \leq x \leq 0.25$) 合金的光反射曲线

Fig. 6 Reflectivity spectra of $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($0 \leq x \leq 0.25$) alloy

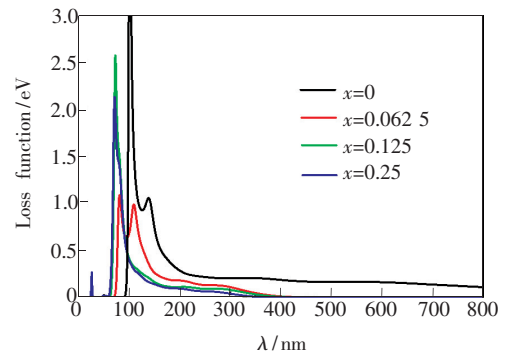


图7 计算所得 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($0 \leq x \leq 0.25$) 合金的能量损失曲线

Fig. 7 Loss function of $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($0 \leq x \leq 0.25$) alloy

和 0.25 时,吸收峰却有明显的红移现象。分析其主要原因可能是实验制得的 ZMO 薄膜中有 Zn 和 O 两种离子的本征缺陷及 Mg 掺杂引起的缺陷存在,引起化合物在可见光范围内存在一定的光吸收。

图6和图7分别给出了 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($0 \leq x \leq 0.25$) 反射谱和能量损失谱。由图6可以看出,在大约 90 nm 和 150 nm 处出现了一系列的反射峰,随着 Mg 浓度的增加,各反射峰强度降低;由图7可知,随着 Mg 浓度的增加,ZMO 能量损失谱也发生明显的蓝移,但 $x=0.0625$ 时的能量损失谱的峰值却明显较低。ZMO 的反射谱和能量损失谱与光吸收曲线变化趋势基本一致,均随着 Mg 含量的增加而发生一定的蓝移。

4 结 论

本文基于密度泛函理论框架下的第一性原理平面波超软赝势,采用 GGA + U 方法,系统地计算了 $Zn_{1-x}Mg_xO$ (ZMO) ($0 \leq x \leq 0.25$) 的电子结构和光吸收性质。计算结果表明,Mg 的掺入使其电子结构发生了较大的改变,禁带宽度随 Mg 含量的增加而增大,本征半导体 ZnO 在可见光 (350 ~ 800 nm) 范围内存在一定的光吸收,随着掺杂成分 Mg 含量的不断增加,ZMO 在可见光范围内的光吸收系数几乎为 0,吸收边峰值存在紫外光区,反射谱和能量损失谱均发生明显的蓝移。该结果表明固溶体 ZMO 是一种光电性能良好的半导体材料,在光电器件方面具有潜在的应用价值。

参 考 文 献:

- [1] MAKINO T, SEGAWA Y, KAWASAKI M, *et al.*. Band gap engineering based on $Mg_xZn_{1-x}O$ and $Cd_yZn_{1-y}O$ ternary alloy film [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2001, 78:12-37.
- [2] 陈晓航, 康俊勇. $Mg_xZn_{1-x}O$ 结构性质 [J]. 发光学报, 2006, 27(5):761-765.
CHEN X H, KANG J Y. The structure properties of $Mg_xZn_{1-x}O$ [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2006, 27(5):761-765. (in Chinese)
- [3] KEPHART JM, MCCAMY JW, MA Z, *et al.*. Band alignment of front contact layers for high-efficiency CdTe solar cells [J]. *Solar Energy Mater. Solar Cells*, 2016, 157:266-275.
- [4] 申德振, 梅增霞, 梁会力, 等. 氧化锌基材料、异质结构及光电器件 [J]. 发光学报, 2014, 35(1):1-60.
SHEN D Z, MEI Z X, LIANG H L, *et al.*. ZnO-based material, heterojunction and photoelectronic device [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2014, 35(1):1-60. (in Chinese)
- [5] OHTOMO A, KAWASAKI M, KOIDA T, *et al.*. $Mg_xZn_{1-x}O$ as a II-VI wide gap semiconductor alloy [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1998, 72:2466-2468.
- [6] OHTOMO A, TAMURA K, KAWASAKI M, *et al.*. Room-temperature stimulated emission of excitons in ZnO/(Mg, Zn)O superlattices [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2000, 77(14):2204-2206.
- [7] TAKASHI M, YASUHIRO H, TAKUYA S, *et al.*. Cu(In, Ga)Se₂ solar cells with controlled conduction band offset of window/Cu(In, Ga)Se₂ layers [J]. *J. Appl. Phys.*, 2001, 89:8327-8330.
- [8] CHIO C H, KIM S H. Effects of post-annealing temperature on structural, optical, and electrical properties of ZnO and $Zn_{1-x}Mg_xO$ films by reactive RF magnetron sputtering [J]. *J. Cryst. Growth*, 2005, 283(1-2):170-179.
- [9] KUMAR P, MALIK H K, GHOSH A, *et al.*. Bandgap tuning in highly c-axis oriented $Zn_{1-x}Mg_xO$ thin films [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2013, 102(22):041301.
- [10] 张德恒, 张锡健, 王卿璞, 等. MgZnO 薄膜及其量子阱和超晶格的发光特性 [J]. 发光学报, 2004, 25(2):111-116.
ZHANG D H, ZHANG X J, WANG Q P, *et al.*. Luminescence characteristic of MgZnO films and multi-quantum wells and superlattices [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2004, 25(2):111-116. (in Chinese)
- [11] 靳锡联, 姜世云, 孔德国, 等. Mg 掺杂 ZnO 所致的禁带宽度增大现象研究 [J]. 物理学报, 2006, 55(9):4809-4815.
JIN X L, LOU S Y, KONG D G, *et al.*. Investigation on the broadening of band gap of wurtzite ZnO by Mg-doping [J]. *Acta Phys. Sinica*, 2006, 55(9):4809-4815. (in Chinese)
- [12] 史秀洋, 苏希玉, 王梅. Li 掺杂 ZnO 系统的电子结构和光学性质 [J]. 发光学报, 2014, 35(12):1455-1458.
SHI X Y, SU X Y, WANG M. Electronic structure and optical properties of Li-doped ZnO systems [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2014, 35(12):1455-1458. (in Chinese)
- [13] ZHANG X D, GUO M L, LIU C L, *et al.*. First-principles investigation of electronic and optical properties in wurtzite $Zn_{1-x}Mg_xO$ [J]. *Eur. Phys. J. B*, 2008, 62:417-421.
- [14] 吴孔平, 王智, 陈昌兆, 等. 纤锌矿 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 极化特性的第一性原理 GGA + *U* 方法研究 [J]. 发光学报, 2015, 36(5):497-501.
WU K P, WANG Z, CHEN C Z, *et al.*. Polarization properties of wurtzite structure $Zn_{1-x}Mg_xO$: A GGA + *U* investigation [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2015, 36(5):497-501. (in Chinese)
- [15] CLARK S J, SEGALL M D, PICKARD C J, *et al.*. First principles methods using CASTEP [J]. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2005, 14:567-570.
- [16] AHMED R, HASHEMIFAR SJ, AKBARZADEH H, *et al.*. *Ab initio* study of structural and electronic properties of III-arsenide binary compounds [J]. *Comput. Mater. Sci.*, 2007, 39(3):580-586.
- [17] FISCHER T H, ALMLÖF J. General methods for geometry and wave function optimization [J]. *J. Phys. Chem.*, 1992, 96(24):9768-9774.
- [18] KARKI B B, ACKLAND G J, CRAIN J. Elastic instabilities in crystals from *ab initio* stress-strain relations [J]. *J. Phys.: Condens. Matter*, 1997, 9(41):8579-8589.

- [19] HOLM B, AHUJA R, YOURDSHAHYAN Y, *et al.*. Elastic and optical properties of α - and κ - Al_2O_3 [J]. *Phys. Rev. B*, 1999, 59(20):75639-12787.
- [20] ODAKA H, IWATA S, TAGA N, *et al.*. Study on electronic structure and optoelectronic properties of indium oxide by first-principles calculations [J]. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1997, 36(36):5551-5554.
- [21] SHEETZ R M, PONOMAREVA I, RICHTER E, *et al.*. Defect-induced optical absorption in the visible range in ZnO nanowires [J]. *Phys. Rev. B: Condens. Matter*, 2009, 80(19):195314-1-4.



何旭(1980-),女,河南周口人,博士研究生,2011年于四川师范大学获得硕士学位,主要从事光电转换物理与材料方面的研究。

E-mail: hexu1225@126.com



武莉莉(1977-),女,山西太原人,博士,教授,博士生导师,2006年于四川大学获得博士学位,主要从事薄膜太阳能电池材料与器件方面的研究。

E-mail: wulili@scu.edu.cn