



$CdSe_xS_{1-x}$ 电子学结构及光学性质的第一性原理研究

何旭, 武莉莉, 李春秀, 郝霞, 都政

引用本文:

何旭, 武莉莉, 李春秀, 等. $CdSe_xS_{1-x}$ 电子学结构及光学性质的第一性原理研究[J]. 发光学报, 2020, 41(2): 188–193.

HE Xu, WU Li-li, LI Chun-xiu, et al. First-principles Investigation on Electronic Structure and Optical Properties of $CdSe_xS_{1-x}$ [J]. *Chinese Journal of Luminescence*, 2020, 41(2): 188–193.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.3788/fgxb20204102.0188>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

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

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

发光学报. 2018, 39(6): 795–801 <https://doi.org/10.3788/fgxb20183906.0795>

Mg含量对 $Mg_xZn_{1-x}O:Ga$ 薄膜电学性质的影响

Influence of Mg Content on The Electrical Property of $Mg_xZn_{1-x}O:Ga$ Films

发光学报. 2014(12): 1405–1409 <https://doi.org/10.3788/fgxb20143512.1405>

$NaLuF_4:Yb^{3+},Er^{3+}$ 微米晶的制备及上转换发光

Synthesis and Upconversion Luminescence of $NaLuF_4:Yb^{3+},Er^{3+}$ Microcrystals

发光学报. 2013, 34(10): 1319–1323 <https://doi.org/10.3788/fgxb20133410.1319>

$CuBr_xI_{1-x}$ 闪烁薄膜的制备和发光性能

Preparation and Luminescence Properties of $CuBr_xI_{1-x}$ Scintillation Films

发光学报. 2019, 40(10): 1228–1233 <https://doi.org/10.3788/fgxb20194010.1228>

$NaY(MoO_4)_2:Er^{3+}$ 纳米晶体荧光粉的发光与光学温度传感特性

Luminescence and Optical Temperature Sensing Properties of $NaY(MoO_4)_2:Er^{3+}$ Nanocrystalline Phosphor

发光学报. 2017, 38(12): 1582–1590 <https://doi.org/10.3788/fgxb20173812.1582>

文章编号: 1000-7032(2020)02-0188-06

CdSe_xS_{1-x} 电子学结构及光学性质的第一性原理研究

何 旭¹, 武莉莉^{2*}, 李春秀³, 郝 霞², 都 政⁴

(1. 成都纺织高等专科学校, 四川 成都 611731; 2. 四川大学 材料科学与工程学院, 四川 成都 610101;

3. 宜春学院, 江西 宜春 336000; 4. 国家级计算深圳中心, 广东 深圳 518055)

摘要: CdSe 是 II-VI 族中重要的半导体材料, 一定条件下可与 CdS 形成无限固溶体 CdSe_xS_{1-x} (0 ≤ x ≤ 1)。CdSe_xS_{1-x} 在薄膜太阳能电池及光电器件等领域具有重要的应用, 对 CdSe_xS_{1-x} 的电子学结构和光学性质进行研究有助于进一步提高其在光电器件等方面的应用。基于第一性原理, 采用平面波超软赝势方法, 计算了 CdSe_xS_{1-x} 的电子学结构及光学性质, 并将计算结果与实验进行了对比。结果表明, CdSe_xS_{1-x} 的晶格常数随着 Se 组分的增加呈线性增大趋势, 态密度向低能级方向移动, 禁带宽度减小, 光吸收边发生一定程度的蓝移。当 Se 含量为 0.5 时, CdSe_xS_{1-x} 的光折射、反射和能量损失最大。除了 Se 和 S 的比例为 1:1 时 CdSe_xS_{1-x} 所属晶系为三斜晶系, 其他比例下均为立方晶系。理论计算结果与实验符合。

关键词: CdSe_xS_{1-x}; 第一性原理; 电子结构; 光学性质

中图分类号: 0477.5; 0472+.3 文献标识码: A DOI: 10.3788/fgxb20204102.0188

First-principles Investigation on Electronic Structure and Optical Properties of CdSe_xS_{1-x}

HE Xu¹, WU Li-li^{2*}, LI Chun-xiu³, HAO Xia², DU Zheng⁴

(1. Chengdu Textile College, Chengdu 611731, China;

2. College of Materials Science and Engineering, Sichuan University, Chengdu 610064, China;

3. Yichun University, Yichun 336000, China; 4. National Supercomputing Center in Shenzhen, Shenzhen 518055, China)

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

Abstract: Cadmium selenide (CdSe) is a classic II-VI semiconductor material. Most often, CdSe with CdS can form ternary alloys CdSe_xS_{1-x} (0 ≤ x ≤ 1). CdSe_xS_{1-x} has a large application in transparency electrode of CdTe thin-film solar cells and optoelectronic device. It is helpful to improve CdSe_xS_{1-x} application value in photoelectric devices studying of its photoelectric properties. This paper calculates and analyzes the electronic structure and optical properties of CdSe_xS_{1-x} ternary alloys with plane pseudo-potential method based on first-principles calculations. The calculated results are compared with the experimental results. The calculation results show that the lattice constant of CdSe_xS_{1-x} ternary alloy crystal forming after Se substitutes S partly or wholly presents a trend of linear increase with the increase of Se content. Except Se:S = 1:1 the crystal system of CdSe_xS_{1-x} alloy with other ration does not change, forbidden gap decreases gradually and the peak value of state density gradually shifts towards the direction of high energy with the increase of Se content. In addition, the absorption edge exhibits a blue shift with Se concentration increasing. At the same time, reflectivity, loss-function and refractive index show their peak values when Se concentration x reaches 0.5. The calculation results are in good agreement with the experiment results.

收稿日期: 2019-09-03; 修订日期: 2019-09-19

基金项目: 国家自然科学基金(61704115); 国家重点研发项目; 牛顿基金中英研究创新(2016YFE0124500)资助项目

Supported by National Natural Science Foundation of China(61704115); National Key Research and Development Program of China; Newton Fund-China-UK Research and Innovations Bridges(2016YFE0124500)

Key words: CdSe_xS_{1-x}; first-principles; electronic structure; optical properties

1 引 言

CdSe 是 II-IV 族中重要的直接带隙半导体材料,禁带宽度约为 1.69 eV^[1],在可见光范围内光吸收系数高达 10⁵ cm⁻¹,被广泛应用于二极管、太阳能电池及光催化等领域^[2-3]。Paudel 等^[4]首次将 CdSe 薄膜作为窗口层引入 CdTe 薄膜太阳能电池中,结果发现器件的短路电流密度得到显著提高。Yan 等^[5]将 CdS/CdSe 组成的复合窗口层用于 CdTe 薄膜太阳能电池中,器件的转换效率得到明显提升。实验研究发现,CdSe 和 CdS 之间由于扩散作用,界面处有合金 CdSe_xS_{1-x} 生成^[6-7]。因此,对 CdSe_xS_{1-x} (0 ≤ x ≤ 1) 的电子学性质及光学性质进行理论研究,有助于进一步揭示 CdSe 用于 CdTe 薄膜太阳能电池窗口层中提高器件转换效率的内在物理机理。

近年来,国内外对 CdSe 及 CdS 光电性质的理论计算进行了大量的研究^[8-9]。Wu 等^[10]采用 B3PW91 方法研究了外电场对 CdSe 基态分子总能量及能隙等性质的影响,结果表明外电场对 CdSe 的禁带宽度值具有一定的影响,其能隙值随电场增加而减小。Zhang 等^[11]采用密度泛函理论(DFT)下的广义梯度近似(GGA)方法计算了 CdSe 和 CdS 的电子学结构和光学性质,由于密度泛函理论对过渡金属氧化物及强关联体系存在低估能隙的问题^[12-13],他们计算得到 CdSe 和 CdS 的带隙值仅为 0.52 eV 和 1.2 eV,远小于它们的带隙实验值 1.70 eV^[14]和 2.42 eV^[15]。目前对 CdSe 与 CdS 形成的合金 CdSe_xS_{1-x} 的理论计算报道较少。基于此,本文采用广义梯度近似 + *U* 的方法对密度泛函理论低估能隙的问题进行修正,对化合物 CdSe_xS_{1-x} 的电子结构和光学性质进行了系统的计算研究,并将理论计算结果与实验进行了比较。理论计算结果为实验探索 CdS/CdSe 复合窗口层在 CdTe 太阳能电池中的应用和高效 CdTe 薄膜太阳能电池器件的制备提供了重要的指导。

2 计算模型和方法

2.1 计算模型

CdSe 和 CdS 本征半导体有闪锌矿、纤锌矿和

熔岩型 3 种结构。通常情况下,它们均以稳定的闪锌矿结构存在^[16](空间群为: *F*-43*M*)。将 CdS 原胞进行 2 × 2 × 2 扩展得到含 64 个原子的超胞结构模型,用 Se²⁻ 取代 S²⁻ 原子,形成固溶体 CdSe_xS_{1-x},如图 1 所示。Se 含量 *x* 的值分别取 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1。通常情况下,对于一个等价掺杂结构,取代掺杂存在多种可能性,取代的位置不同,计算结果可能不尽相同。然而,晶体结构存在空间对称性,根据对称性以及周期性平移条件,可以找到合金取代掺杂的不等价构型,对其进行结构优化,得到最稳定的构像,然后对晶体的电子学和光学性质进行相应的计算。

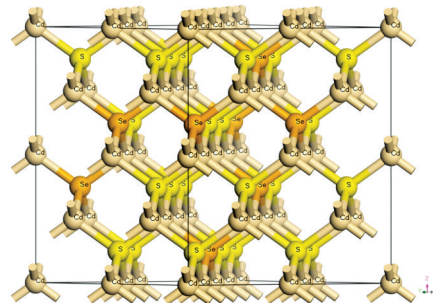


图 1 CdSe_xS_{1-x} 超胞结构模型

Fig. 1 CdSe_xS_{1-x} cubic zinc-blende super cell

2.2 计算方法

本文对 CdSe_xS_{1-x} 电子学及光学性质的计算是基于密度泛函理论(DFT)框架下的 CASTEP 软件包完成的^[17]。电子间交换关联能用广义梯度近似下的 PBE 泛函,电子和离子间的相互作用采用模守恒赝势,几何优化采用 BFGS 算法。布里渊区求和是 2 × 2 × 2 的 Monkhorst-Pack 型 *k* 点网格,平面波截断能为 600 eV,迭代过程中的收敛精度为 1.0 × 10⁻⁶ eV/atom。本文参考文献[18]中对 Cd-3d 和 S-3p 电子分别加上相应的 *U* 值: *U*_d = 5 eV, *U*_p = 4 eV,以修正电子之间的库仑占位势。

3 结果与讨论

3.1 晶体结构

对不同 Se 组分下的 CdSe_xS_{1-x} 晶胞结构优化,得到晶体的结构参数如表 1 所示。理想 CdSe 和 CdS 是闪锌矿结构,晶格常数 *a* = *b* = *c*, α = β = γ = 90°。随 Se 含量的增加,CdSe_xS_{1-x} 晶格常数从

表 1 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 合金的晶体结构参数 ($0 \leq x \leq 1$) 和晶胞参数
 Tab. 1 Calculated lattice parameters and band gaps of $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ alloy ($0 \leq x \leq 1$)

Compounds	x	Lattice parameters/nm		
		Our work	Exp.	Other cal.
$\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$	0	$a = b = c = 0.581$	0.582 ^a	0.581 ^b
	0.25	$a = b = c = 0.586$		
	0.5	$a = b = 0.589, c = 0.592$		
	0.75	$a = b = c = 0.598$		
	1	$a = b = c = 0.605$	0.605 ^a	0.621 ^b

^a Ref. [19] Exp, ^b Ref. [20] LDA.

$x = 0$ 时的 0.581 nm 逐渐增大到 $x = 1$ 时的 0.605 nm, 呈线性增大趋势。这是由于 Se 的离子半径 (0.198 nm) 大于 S 离子半径 (0.184 nm) 引起的。当 Se 和 S 的组分为 1:1 时, $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 晶格发生畸变, 晶体所属晶系由立方晶系向三斜晶系转变, 此时 $\alpha = 85.6^\circ, \beta = 84.9^\circ, \gamma = 115.7^\circ$ 。本文计算得到的结果与文献 [19-20] 中采用同样计算方法得到的结果接近。

3.2 电子学结构

图 2 分别给出了采用 GGA + U 方法计算得到的 CdSe 和 CdS 能带结构及不同 Se 含量下 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 的总态密度。CdSe 禁带宽度为 1.68 eV, CdS 禁带宽度为 2.37 eV, 接近它们的实验带隙值^[14-15]。CdSe _{x} S _{$1-x$} 中参与成键的电子分别为: Cd-4d¹⁰ 5s², S-3s² 3p⁴, Se-4s² 4p⁴。随着 Se 含量的增加, $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 的导带底和价带顶态密度分布形状变化不是十分明显, 但随着 Se 组分的增加, 态密度的峰值增大, 导带部分随着 Se 组分的增加逐渐向低能级方向移动, 导致 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 禁带宽度逐渐减小。

采用磁控溅射法, 我们在室温下制备了不同 Se 含量的 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 薄膜。Se 含量 x 的值采用德国斯派克 (Spectro Arcos) 公司的电感耦合等离子体发射的 Lambda 950 型号的分光光度计测量得到, 如图 3(a) 所示。由于 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 为直接带隙半导体, 由透过率曲线计算得到 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 的光吸收系数, 然后根据公式 $(\alpha h\nu)^2 = A(h\nu - E_g)$ 做出 Tauc 曲线, 如图 3(b) 所示。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, 将图 3(b) 中的曲线线性部分延长与横坐标相交, 交点所对应的能量即为 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 薄膜

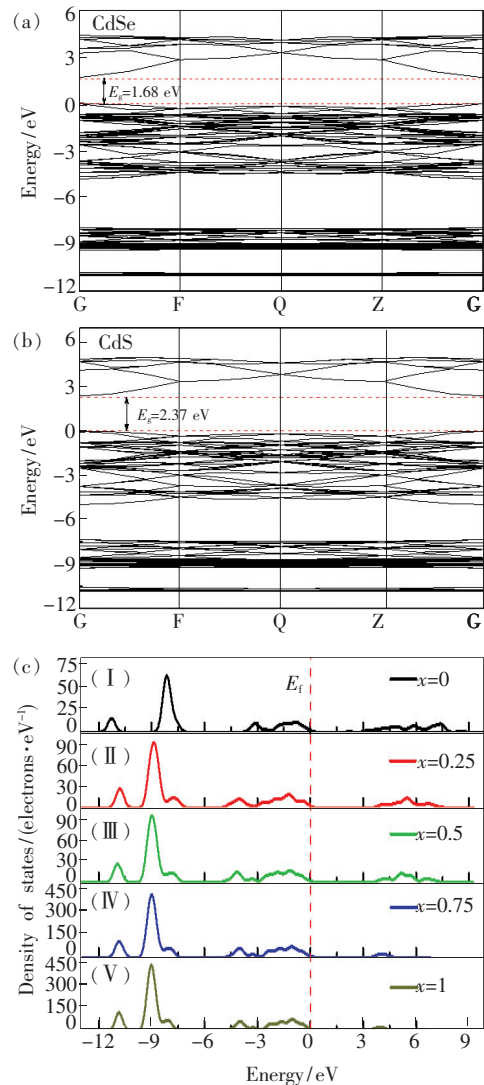


图 2 CdSe (a) 和 CdS (b) 能带及不同 Se 含量下 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 总态密度图 (c)。 (I) $x = 0$; (II) $x = 0.25$; (III) $x = 0.5$; (IV) $x = 0.75$; (V) $x = 1$ 。

Fig. 2 Band structures of CdSe (a) and CdS (b) and total density of states of $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ alloy as a function of Se concentration x (c). (I) $x = 0$. (II) $x = 0.25$. (III) $x = 0.5$. (IV) $x = 0.75$. (V) $x = 1$.

的光学禁带宽度 E_g 的值。

不同材料的晶格是否匹配取决于材料的晶体结构和晶格常数。由前面 3.1 部分的讨论可知, 除 S 和 Se 的比例为 1:1 外, CdSe_xS_{1-x} 薄膜均为立方结构, 且其晶格常数随组分变化而不同, 因此, Se 的组分变化对 CdSe_xS_{1-x} 薄膜内部的缺陷密度产生影响, 复合中心的数目也会随之变化, 即薄膜的光学透射峰所在的位置也有所不同。

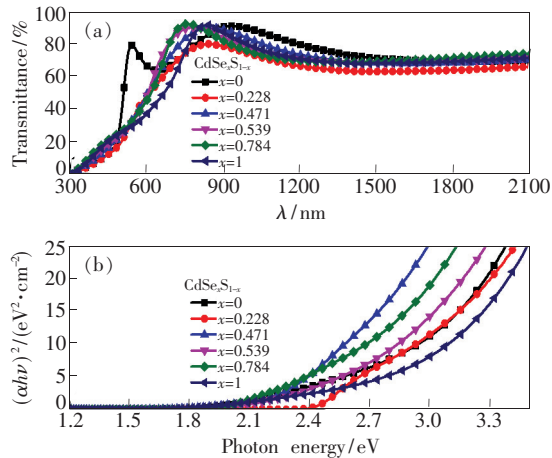


图 3 CdSe_xS_{1-x} 薄膜的光透过谱(a)和光学带隙图(b)
Fig. 3 Transmittance spectra(a) and band-gap(b) of CdSe_xS_{1-x} films

图 4 给出了不同 Se 组分下 CdSe_xS_{1-x} 禁带宽度值。其中蓝色和红色曲线分别为采用 GGA 和 GGA + U 两种方法计算得到的结果, 黑色曲线为实验结果。由图 4 可知, 随着 Se 组分增加, CdSe_xS_{1-x} 禁带宽度逐渐减小, 采用 GGA + U 方法得到的结果与实验值更接近。虽然相同 Se 组分下, GGA 方法计算得到的结果明显低于实验值, 但随着 x 值的增加, 与实验结果的变化趋势是一致的。

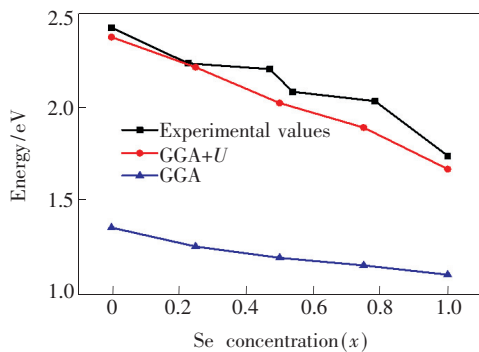


图 4 不同 Se 含量下 CdSe_xS_{1-x} 的禁带宽度
Fig. 4 Band gaps of CdSe_xS_{1-x} alloy as a function of Se concentration x

3.3 光学性质

图 5 给出了计算得到的不同 Se 含量下 CdSe_xS_{1-x} 的光吸收、光反射和光损失谱。由图 5(a) 可以看出, 不同 Se 含量下, CdSe_xS_{1-x} 光吸收边均位于光子能量约为 1.76 eV 处。在能量为 1.76 ~ 16.56 eV 范围内有 3 个吸收峰值, 分别位于能量为 5.15, 7.79, 19.85 eV 处。分析认为, CdSe_xS_{1-x} 光吸收的 3 个峰值主要是 S-3p 电子向导带跃迁的结果。由于半导体材料光吸收峰的强度与电子在带间的跃迁有关, 随着 Se 含量增加, S 含量不断减少, 光子能量在 1.76 ~ 16.56 eV 范围内时, 电子跃迁总数不断减少, 吸收峰值逐渐降低且向低能级方向移动。该结果表明, 相比于 CdS, CdSe 对光的吸收能力更强。

半导体材料的反射峰是电子在光电磁波场微扰作用下发生带间跃迁的宏观表现。损失函数描述了电子被集体激励的频率。由图 5(b) 可知, 随着光子能量的增加, 反射率也在增加, 并在 Se 组分为 0.5、光子能量约为 10.12 eV 时达到峰值。损失函数描述了当电子快速通过材料时能量的损失, 图谱中峰的出现可认为是等离子体激发所致, 而峰位则表明了电子被集体激励的频率。由图 5(c) 可知, CdSe_xS_{1-x} 光能量损失谱在 Se 含量为 0.5、光子能量在 10 ~ 12 eV 范围内达到峰值。

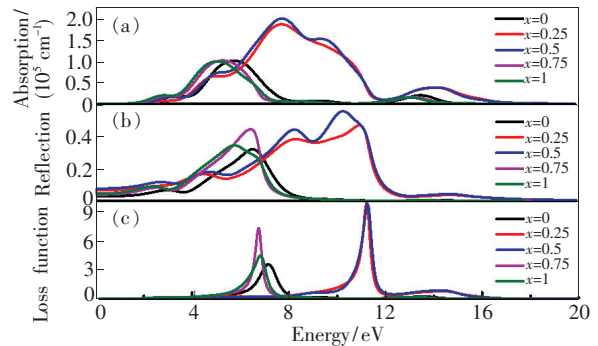


图 5 CdSe_xS_{1-x} 的光吸收(a)、光反射(b)和光损失谱(c)
Fig. 5 Absorption(a), reflectivity(b) and loss function(c) of CdSe_xS_{1-x} alloy.

图 6 (a)、(b) 分别给出了折射率 n 和消光系数 k 与 Se 含量 x 之间的变化关系曲线。半导体材料的折射率和消光系数均与电子的跃迁相关联。由图 6(a) 可知, Se 含量从 0 逐渐增加到 1 时, CdSe_xS_{1-x} 折射率 n 的值主要集中在光子能量 1.41 ~ 1.74 eV 范围内。当 Se 含量为 0.5 时, n

最大。由图 6(b)可知,当 Se 含量 x 为 0.5 时,消光系数 k 在光子能量为 7.69 eV 处达到峰值。峰位主要是价带电子向导带跃迁的结果,最后一个峰值主要是 Se-4s 向导带跃迁的结果。Se 含量为 0, 0.75, 1 时,消光系数随光子能量变化曲线整体向低能级方向移动。

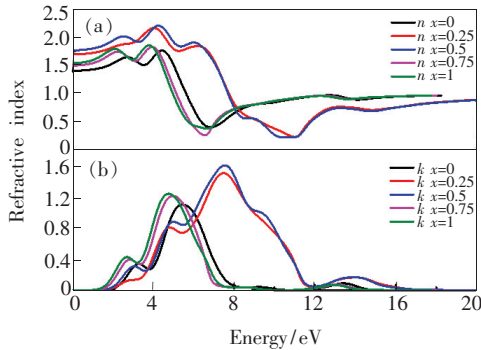


图 6 不同 Se 含量下 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 的复折射率实部(a)和虚部(b)

Fig. 6 Real(a) and imaginary(b) parts of refractive index of $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ alloy

图 7(a)、(b)分别为计算得到的 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 复电导率的实部和虚部。由图 7(a)可知,当 Se 含量为 0, 0.75, 1 时,在光子能量约为 5 eV 附近,电导率达到峰值,而 Se 含量为 0.25 和 0.5 时,在光子能量为 7.07 eV 处电导率达到峰值,而后随着光电子能量的增加而减小,光子能量约为 16.25 eV 时,光电导率为 0。由图 7(b)可以看出,在能量小于 6.93 eV 的区域内,电导的虚部小于 0。 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 的光电导率谱线随光电子能量变化仍然因 Se 含量的不同而分为两部分,Se 含量为 0.25 和 0.5 时的峰值位于能量为 8.03 eV 处。

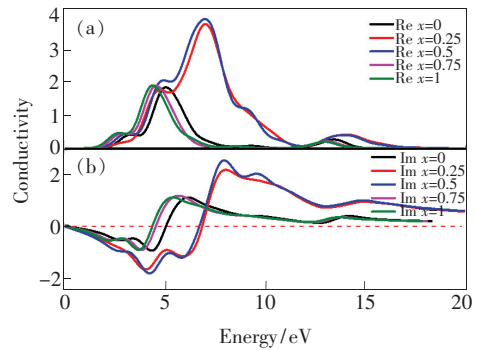


图 7 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 光电导率的实部(a)和虚部(b)

Fig. 7 Real(a) and imaginary(b) parts of conductivity of $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ alloy

4 结 论

基于密度泛函理论框架下的广义梯度近似 + U 方法,本文计算并分析了 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 的电子学结构和光学性质。结果表明,随着 Se 组分的增加, $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 的晶格常数呈线性趋势增加,当 Se 和 S 的组分比例为 1:1 时,晶格畸变最大,所属晶系结构不再为立方晶系。 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 导带底和价带顶态密度分布形状随着 Se 含量的增加变化并不明显,但态密度的峰值逐渐增大,导带部分逐渐向低能级方向移动,从而导致其禁带宽度由 2.42 eV 逐渐减小到 1.69 eV,结果与实验相符合。 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 光吸收边随 x 值的增加而发生一定程度的蓝移。 $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 的光反射谱、折射谱、光损失函数等均随着 Se 组分 x 值的变化而发生改变, $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ 光反射和光能量损失谱在 Se 含量为 0.5 时,光子能量在 10.75 ~ 11.89 eV 范围内达到峰值。

参 考 文 献:

- [1] HUSAIN M, SINGH B P, KUMAR S, *et al.*. Optical, electrical and structural investigations on $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Se}$ sintered films for photovoltaic applications [J]. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 2003, 76(3):399-415.
- [2] FERKIDES C S, BALASUBRAMANIAN U, MAMAZZA R, *et al.*. CdTe thin film solar cells: device and technology issues [J]. *Sol. Energy*, 2004, 77(6):823-830.
- [3] LI C X, WANG F G, CHEN Y L, *et al.*. Characterization of sputtered CdSe thin films as the window layer for CdTe solar cells [J]. *Mater. Sci. Semicond. Process.*, 2018, 83:89-95.
- [4] PAUDEL N R, GRICE C R, XIAO C X, *et al.*. The effects of high temperature processing on the structural and optical properties of oxygenated CdS window layers in CdTe solar cells [J]. *J. Appl. Phys.*, 2014, 116:044506.
- [5] PAUDEL N R, XIAO C X, YAN Y F. Close-space sublimation grown CdS window layers for CdS/CdTe thin-film solar cells [J]. *J. Mater. Sci.; Mater. Electron.*, 2014, 25(4):1991-1998.
- [6] DUFFY N W, PETER L M, WANG R L. Characterisation of CdS/CdTe heterojunctions by photocurrent spectroscopy and

- electrolyte electroreflectance/absorbance spectroscopy (EEA/EER) [J]. *J. Electroanal. Chem.*, 2002, 532(1-2): 207-214.
- [7] PAUDEL N R, YAN Y F. Enhancing the photo-currents of CdTe thin-film solar cells in both short and long wavelength regions [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2014, 105(18): 183510.
- [8] 杨峻宏, 张高峰, 高俊芳, 等. CdSe: Nd 纳米晶及 CdSe: Nd@ SiO₂ 核壳结构的合成及发光性能 [J]. *发光学报*, 2018, 39(9): 1260-1267.
- YANG J H, ZHANG G F, GAO J F, *et al.*. Synthesis and fluorescence properties of CdSe: Nd and CdSe: Nd@ SiO₂ core-shell structures [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2018, 39(9): 1260-1267. (in Chinese)
- [9] 王亚超, 王梅, 苏希玉, 等. Mg 掺杂 CdSe 电子结构和光学性质的第一性原理 [J]. *发光学报*, 2010, 31(6): 842-847.
- WANG Y C, WANG M, SU X Y, *et al.*. First-principles on the electron structure and optical properties of the Mg-doped CdSe system [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2010, 31(6): 842-847. (in Chinese)
- [10] 吴永刚, 李世雄, 郝进欣, 等. 外电场下 CdSe 的基态性质和光谱特性研究 [J]. *物理学报*, 2015, 64(15): 153102-1-7.
- WU Y G, LI S X, HAO J X, *et al.*. Properties of ground state and spectrum of CdSe in different external electric fields [J]. *Acta Phys. Sinica*, 2015, 64(15): 153102-1-7. (in Chinese)
- [11] 张淑华, 柳福提, 程晓洪. CdS 电子结构与光学性质的第一性原理计算 [J]. *宜宾学院学报*, 2011, 11(12): 77-80.
- ZHANG S H, LIU F T, CHENG X H. First-principles calculations of electronic structure and optical properties of CdS [J]. *J. Yibin Univ.*, 2011, 11(12): 77-80. (in Chinese)
- [12] 何旭, 武莉莉, 任胜强, 等. 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 [J]. *发光学报*, 2018, 39(6): 795-801.
- HE X, WU L L, REN S Q, *et al.*. First-principles GGA + U investigation on the electronic structure and optical properties of Zn_{1-x}Mg_xO [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2018, 39(6): 795-801. (in Chinese)
- [13] 何旭, 任胜强, 李春秀, 等. Zn_{1-x}Mg_xO 能带结构及作为窗口层的 CdTe 薄膜太阳电池的 SCAPS 仿真应用 [J]. *无机材料学报*, 2018, 33(6): 635-640.
- HE X, REN S Q, LI C X, *et al.*. Zn_{1-x}Mg_xO: band structure and simulation as window layer for CdTe solar cell by SCAPS software [J]. *J. Inorg. Mater.*, 2018, 33(6): 635-640. (in Chinese)
- [14] FARROW R F C. MBE growth of II-IV and IV-VI compounds and alloys [M]. CHANG L L, PLOOG K. *Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures*. Dordrecht: Springer, 1985.
- [15] ISLAM R, BANERJEE H D, RAO D R. Structural and optical properties of CdSe_xTe_{1-x} thin films grown by electron beam evaporation [J]. *Thin Solid Films*, 1995, 266(2): 215-218.
- [16] POLLEHN H K. Performance and reliability of third-generation image intensifiers [J]. *Adv. Electron. Electron Phys.*, 1985, 64: 61-69.
- [17] WANG W, BANERJEE S, JIA S G, *et al.*. Ligand control of growth, morphology, and capping structure of colloidal CdSe nanorods [J]. *Chem. Mater.*, 2007, 19(10): 2573-2580.
- [18] WU Y L, CHEN G D, ZHU Y Z, *et al.*. LDA + U/GGA + U calculations of structural and electronic properties of CdTe: dependence on the effective U parameter [J]. *Comput. Mater. Sci.*, 2015, 98: 18-23.
- [19] ARUSHANOV E K. II₃V₂ compounds and alloys [J]. *Prog. Cryst. Growth Charact. Mater.*, 1992, 25(3): 131-201.
- [20] DELIGOZ E, COLAKOGLU K, CIFTCI Y. Elastic, electronic, and lattice dynamical properties of CdS, CdSe, and CdTe [J]. *Phys. B: Condens. Matter*, 2006, 373(1): 124-130.



何旭(1980 -), 女, 河南周口人, 博士, 副教授, 2019 年于四川大学获得博士学位, 主要从事光电转换物理与材料方面的理论仿真的研究。
E-mail: hexu1225@126.com



武莉莉(1977 -), 女, 山西太原人, 博士, 教授, 博士研究生导师, 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