

氧化锌电子结构的压力效应的理论研究

李凡生¹, 张飞鹏², 余小英¹, 房 慧¹, 张 忻³, 路清梅³

(1. 广西民族师范学院 物理与电子工程系, 广西 崇左 532200; 2. 河南城建学院 数理学院, 河南 平顶山 467036;

3. 北京工业大学 材料科学与工程学院, 新型功能材料教育部重点实验室, 北京 100124)

摘 要: 基于平面波函数密度泛函理论研究了不同压力条件下纤锌矿结构氧化锌的晶格结构和电子结构。计算结果表明, 氧化锌的晶格参数和 Zn—O 键长随外压力的增加先增大后逐渐减小, 晶胞纵横轴长之比增大, 晶格对称性保持不变; 带隙类型均为直接带隙, 其宽度随外压力增加先降低后逐渐增大, 零压力下其存在着 0.908 eV 的直接带隙, 在最大压力 100 GPa 下其带隙达 0.993 eV; 费米能级附近的状态密度随压力增加有增大的趋势, 电子局域化趋势明显。分析结果表明, 随着外压力的增加, 氧化锌费米能级下方附近的载流子有效质量先增大后减小; 导带的载流子有效质量均较小。外界加力还改变了氧化锌体系的电子分布情况。

关键词: 氧化锌; 密度泛函; 压力效应; 晶体结构; 电子结构

中图分类号: TN304.2; O649

文献标识码: A

Theoretical Investigation of Influences of Pressure on Electronic Structure of Zinc Oxide

LI Fansheng¹, ZHANG Feipeng², YU Xiaoying¹, FANG Hui¹, ZHANG Xin³, LU Qingmei³

(1. Dept. of Physics and Electronic Engineering, Guangxi Normal University for Nationalities, Chongzuo 532200, China;

2. Institute of Physics, Henan University of Urban Construction, Pingdingshan 467036, China;

3. Key Lab. of Advanced Functional Materials, Chinese Ministry of Education, College of Materials Science and Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China)

Abstract: The crystal structure and electronic structure of the Wurtzite type ZnO at different exoteric pressures have been investigated based on the density functional theory calculations of the plane wave. The results show that the lattice parameters of ZnO and ZnO bond length are increased firstly and then decreased with the increase of the external pressure, the ratio of vertical and horizontal axis increases, while the symmetry of the structure remain unchanged. The band gaps are all direct gap, the gap width decreases firstly and then increases along with increasing the exoteric pressure. The band gap is 0.908 eV for the un-pressed ZnO and the band gap of the ZnO at 100 GPa is increased to 0.993 eV. The density of states near Fermi level can be increased by increasing the exoteric pressure and the localization of the electrons can be enhanced. The analyzing results has shown that the effective mass of the carriers under the Fermi level can be enhanced firstly and then depressed by increasing the exoteric pressure, the effective mass of the carriers above the Fermi level is slightly light. The distribution of the electrons at different orbitals can be modulated by altering the exoteric pressure.

Key words: Zinc Oxide; density functional theory; pressure effects; crystal geometric structure; electronic structures

0 引言

热电功能材料依靠温差或电位差来驱动载流子, 将热能和电能直接相互转换。高的电导率、赛贝克系数和低的热导率是其必须具备的性质, 即具备“载流子导体-声子绝缘体”的性质^[1-3]。目前, 碲化

物材料, 方钴矿材料及笼合物材料, 硅化物材料及氧化物材料分别是研究成熟的室温、中温和高温区热电材料^[1-12]。目前研究的一类二元简单结构氧化物热电材料体系氧化锌(ZnO)是一种重要的无机功能氧化物材料, 对于其在压电和光电等性质方面的关

收稿日期: 2014-12-14

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11347141, 21465004); 广西民族师范学院博士科研启动基金资助项目(2013RCBS001); 广西民族师范学院学科带头人科研启动基金资助项目(2014RCDT002); 广西高等学校科学技术研究基金资助项目(2013YB268)

作者简介: 李凡生(1974-), 男, 广西隆安人, 副教授, 硕士, 主要从事计算物理与大学物理实验方面的研究。E-mail: 453291572@qq.com。通信作者: 余小英(1972-), 女, 广西隆安人, 副教授, 硕士, 主要从事功能材料和大学物理实验方面的研究。E-mail: 414269867@qq.com。

注较早,但对于其热电性质方面的研究是近些年才开始的^[10-13]。有报道表明掺杂的 ZnO 基氧化物在高温领域的热电性质优值系数可达 0.65^[3]。晶体结构和电子结构决定了固体的物理性质,必须在晶格结构、晶格振动、载流子、声子与载流子相互作用及制备工艺方面进行优化才能实现提高其热电性质的目标^[10-17]。晶格结构在外界压力条件下可实现微调,离子、电子与电子间的相互作用会得到调整,声子与载流子相互作用也会得到调整,通过这些电子结构和晶格振动性能的调控,可实现电学参数和热学参数的协同优化,提高其热电性质^[18-21]。文献[18]表明,随着压力的增加,碳纳米管之间产生结合,性质可由金属态转变为半导体态,然后又转变为金属态,载流子的迁移得到调节。文献[19]报道了外压力下闪锌矿结构 GaN 的电子结构,其电子结构与外压力之间存在着相互依赖关系,其带宽随着外界压力的增大而变宽,其费米面附近载流子的有效质量也得到调控。文献中对一定压力下闪锌矿 CdS 的研究表明,载流子跃迁类型及带隙类型也受压力控制,在 116.8 GPa 的压力下闪锌矿 CdS 发生相变,带隙由直接型转变为间接型^[20]。文献[21]对不同压力条件下纤锌矿结构 ZnS 进行研究,提高压力其 Zn—S 键长缩短,构成离子之间相互作用增强,价带和导带分别远离费米面,带隙增大。另外,材料的磁学性质也受外压力控制^[22]。但迄今为止还没有外界压力对 ZnO 电子结构的理论研究报道。掺杂 ZnO 基材料的性质已有研究^[17, 23, 24],本文基于平面波密度泛函理论的基础上系统研究了外界压力对 ZnO 的晶格结构和电子结构的影响,并分析了压力对 ZnO 热电性质的影响。

1 模型与计算过程

1.1 晶体结构模型

图 1 为纤锌矿 ZnO 的晶体结构模型,图中 a_1 、 a_2 、 a_3 为晶胞基矢。常温、常压下,纤锌矿结构 ZnO 呈六角对称的晶体结构,空间群 $P6_3MC$,晶格参数 $a=b=0.324\ 9\text{ nm}$, $c=0.522\ 9\text{ nm}$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$ 。该复式晶格结构由 2 个六方密堆积子晶格套构而成,每个子晶格分别由 Zn、O 原子构成。在模拟压力下的结构和电子结构计算中,对其所受外压采用等静压模型,即在晶体 3 个方向上各施加压力 p , p 分别取 0, 1 GPa, 10 GPa 和 100 GPa。

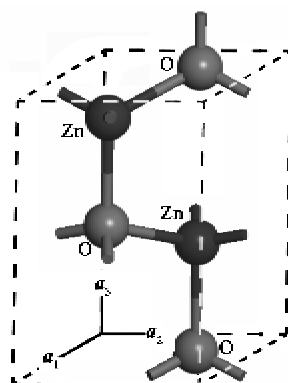


图 1 ZnO 的三维晶体结构示意图

1.2 计算过程与方法

计算工作在剑桥系列总能量包(CASTEP)上进行^[13-17]。该软件模块使用成熟的量子化学计算程序,它是一个基于密度泛函理论方法的从头算法程序,特别适合于计算具有周期性结构的固态物质,能实际有效地分析三维周期性系统。已广泛应用于陶瓷、半导体、金属等多种材料的研究,可研究晶体材料(半导体、陶瓷、绝缘体等)的性质。计算过程中,外层价电子波函数在密度泛函理论基础上的平面波函数展开,电子交换关联函数采用广义梯度近似(GGA-PBE)。计算过程中,各原子外层价电子分别取为 $\text{Zn}(3d^{10} 4s^2)$, $\text{O}(2s^2 2p^4)$ 。电子与原子核相互作用函数采用 Vanderbilt 赝势描述。在体系最低能量计算过程中,原子的位移收敛精度标准设置为 0.000 1 nm,价电子平面波函数基矢截断能量标准设置为 340 eV,收敛精度标准为 0.01 meV/atom。在电子结构计算中,对倒空间布里渊区 k 点采用 Monkhorst-pack 网格方法进行采样, k 点的网格取为 $5 \times 5 \times 4$,收敛精度取为 0.01 meV/atom。纤锌矿 ZnO 的布里渊区的高对称点分别是 $G(0,0,0)$, $A(0,0,0.500)$, $H(-0.333, 0.667, 0.500)$, $K(-0.333, 0.667, 0)$, $M(0, 0.500, 0)$, $L(0, 0.500, 0.500)$ 。

2 结果与讨论

2.1 几何结构

分别对不同外加压力下 ZnO 的晶格结构模型进行结构优化,最后得到稳定状态时的晶格结构参数,图 2 为计算所得 ZnO 的晶格参数与外加压力间的关系。由图可看出, ZnO 氧化物晶格参数 a 、 b 均随外加压力的增加先增大后逐渐减小,并在最高压力下达到最小值。在外加小压力条件下,晶格参数增加,但增加的趋势较弱;当外加压力大于 1 GPa

时,晶格参数随外加压力增加逐渐减小,并在计算最大压力 100 GPa 时达最小值。晶胞体积变化趋势与各轴变化一致。表 1 为 ZnO 中平行于 ab 平面内的 Zn—O 键长之比 l_{ab} 与 c 方向的 Zn—O 键长之比 l_c 及其比例。由表可看出,随着外加压力的增大, Zn—O 键先增大,后逐渐缩短,并在最大外压力条件下达到最小值;与晶格参数的变化趋势相比较可看出,其变化趋势相同。但这两种键长的比例变化与晶胞参数的变化不同,即 l_{ab} 与 l_c 之比在有外压力条件下均大于无压力条件下的比值,其随压力增加逐渐减小。表明 ZnO 有各向同性外压力条件下的晶格畸变,这种畸变程度随外压力的增大逐渐减小,但在外压力条件下始终存在着这种畸变。图 3 为 c 与 a 、 b 轴之比。由图可看出, c/a 随外压力增大逐渐增大,同无压力下的 ZnO 晶格结构相比,这也说明了在压力条件下 ZnO 的晶格畸变。

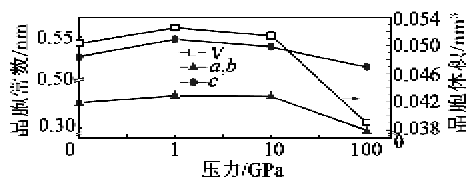
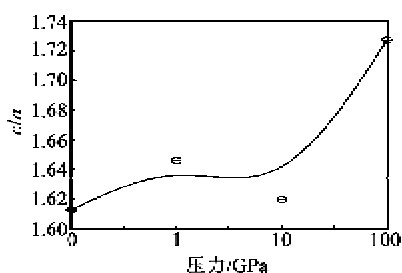


图2 不同压力条件下 ZnO 的晶胞参数和体积

表1 不同压力条件下 ZnO 的键长及其比值

p/GPa	0	1	10	100
l_{ab}/nm	0.201 281	0.201 776	0.201 343	0.183 217
l_c/nm	0.202 056	0.211 997	0.207 621	0.186 166
c/a	0.100 385	0.105 065	0.103 118	0.101 609

图3 不同压力条件下 ZnO 的 c/a 比

2.2 电子结构

图 4 为不同外加压力条件下 ZnO 的能带结构。在计算过程中,以体系电子能占据的最高能级为费米能,其他各能级以费米能级为原点取相对值。由图可看出,所有压力下 ZnO 的能带中,导带最低能级和价带最高能级均在布里渊区内同一对称点;另外,在布里渊区内,所有电子能量随波矢的变化关系相同,这是因为采用了相同的赝势函数及相似的原

子间作用力模型;其次,费米能级附近的能级数量相等,这些都是由相同的晶格结构及电子数量决定的。在等静压外压力条件下, ZnO 晶格结构不变,均为六角对称的晶体结构。分析不同外加压力条件下 ZnO 的带隙可看出, ZnO 的带隙与外界压力密切相关,未施加压力时带隙宽度为 0.908 eV,施加微小外加力(1 GPa)时,带隙减小,其值为 0.883 eV,施加较大外压力(10 GPa、100 GPa)时,带隙增大,分别达到 0.927 eV 和 0.993 eV。表 2 为计算所得不同外加压力条件下 ZnO 的带隙值。由表可看出,随着外加压力的逐渐增大,体系带隙先减小再逐渐增大,即 ZnO 体系有半导体向导体转变的趋势,再有向绝缘体转变的趋势。这是由于 ZnO 体系的晶格结构参数变化引起的能级分裂程度不同造成的,在大外压力条件下, ZnO 晶格内部产生较大的晶格畸变, Zn—O 键长发生了变化,离子之间相互作用也发生了相应变化,因此引起了能级突变的程度相应变化。文献中对不同单向压力下纳米碳管电子结构的研究表明,随着压力的增加,纳米碳管之间产生了键合,体系由金属态转变为半导体态,继而又转变为活泼金属态^[18]。体系的晶格结构参数在外加压力下发生改变,粒子间的键合作用增强,电子间的相互作用发生变化,因此,材料的能级结构也发生了变化。

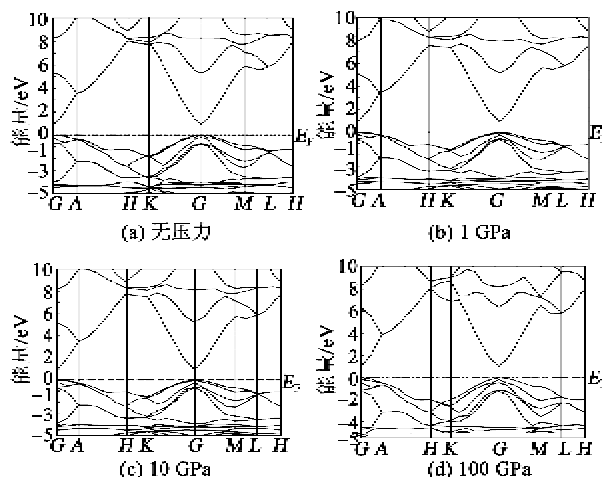


图4 不同压力条件下 ZnO 的能带结构

表2 不同压力条件下 ZnO 的带隙宽度

p/GPa	0	1	10	100
带隙 E_g/eV	0.908	0.883	0.927	0.993

由图 4 可看出,所有 ZnO 的能带结构中,在价带中能级较密,数量较多,分布的能量区域较窄,表

明这些电子定域性较强;而在导带区域的电子随波矢分布能量较宽,表明这些电子离域性较强。此外还可看出,这 2 个区域的电子能量随波矢的变化程度不同,其中导带底的载流子能量随波矢的变化剧烈,而价带顶的载流子能量随波矢的变化缓慢,这表明 2 个电子能量区域不同的电子(空穴)的有效质量。为分析简便,在能带结构中,载流子有效质量 m 可表示电子能量的简单函数为

$$m \propto \left(\frac{\hbar^2}{4\pi^2} \right) / \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right) \quad (1)$$

式中: E 为载流子的能量; k 为倒易空间电子波矢; $\hbar$ 为描述量子大小的普朗克常量^[14-15]。

仔细分析可发现,价带顶的载流子有效质量随外加压力增大有先被增强而后减弱的趋势,在外加压力为 10 GPa 时,价带顶的载流子有效质量达到最大值。计算结果表明,外加压力可调节载流子有效质量,由此调控 ZnO 材料的电学参数。

图 5 为计算所得不同外加压力条件下 ZnO 的电子能量态密度。由计算所得不同外加压力下 ZnO 的总密度结果可看出,费米能级附近的态密度随外加压力的增加有逐渐增加的趋势,如未施加压力时其值为 0.4 eV,压力为 1 GPa、10 GPa 和 100 GPa 时其值分别达 0.8 eV、0.7 eV 和 0.7 eV。费米能级附近的态密度同载流子浓度成正比,由以下分析可看出,ZnO 的载流子浓度随外加压力增大有增加的趋势。计算结果表明外加压力可调节载流子浓度,进而调控 ZnO 材料的电学参数。材料的导电性强弱可用电导率 σ 来表示,固体材料的电导率 σ

可表示为载流子的函数,即

$$\sigma \propto \int \left(\frac{\partial f}{\partial E} \right) D(E) \tau(E) v^2(E) dE \quad (2)$$

式中: f 为费米分布函数; D 为态密度; τ 为载流子弛豫时间; v 为载流子的群速度; E 为能量。

由图 5 分析可得 ZnO 费米能级附近的态密度随外加压力的增加逐渐增大,而载流子群速度

$$v(E) \propto dE/dk \quad (3)$$

分析布里渊区原点载流子的群速度可得,随着外加压力的增大,群速度有不断增大的趋势,并在外加压力达到 100 GPa 时达到最大值。假设 τ 为一个常数,由上述分析可看出,随着外加压力的增大 ZnO 的 σ 有增大的趋势;调节外加压力可调节载流子输运参数,进而调控 ZnO 材料的电学参数和电性能。

分析图 5 各态电子间的相互作用可看出,随着外加压力的增大,Zn、O 原子 s、p、d 电子间的相互作用逐渐增强。低压力条件下,体系 s、p、d 电子主要在费米能级以下 3 个能量区域和费米能级以上 4 个能量区域产生相互作用。在相对高压条件下,体系 s、p、d 电子产生相互作用的能量区域不断增多,在外加压力达 100 GPa 时,体系 s、p、d 电子间的相互作用达到最强,电子局域化也达到最强。图 6 为计算得到的未加外压力 and 外加压力为 100 GPa 时 ZnO 氧化物体系各态电子的分态密度结果。由图可看出,未加外压力 ZnO 价带顶附近的能态密度主要由 O 的 2p 态电子贡献,靠近导带底的能态密度主要由 Zn 的 3p 态电子贡献。Znp 电子、Znd 电子和 Op 电子之间有相互作用,Op 电子和 Znp 电子

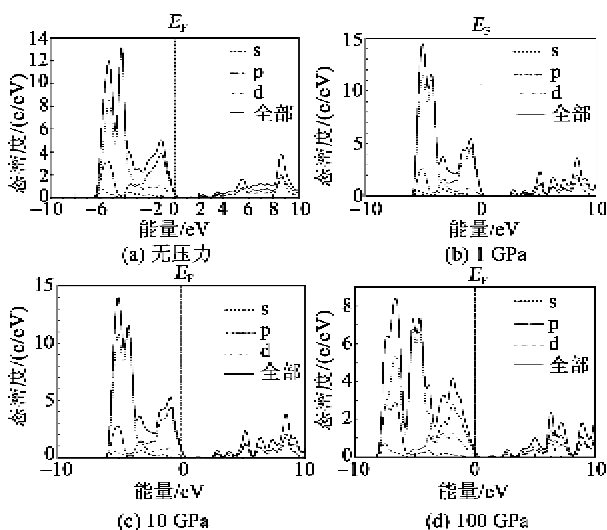


图 5 不同压力条件下 ZnO 的态密度

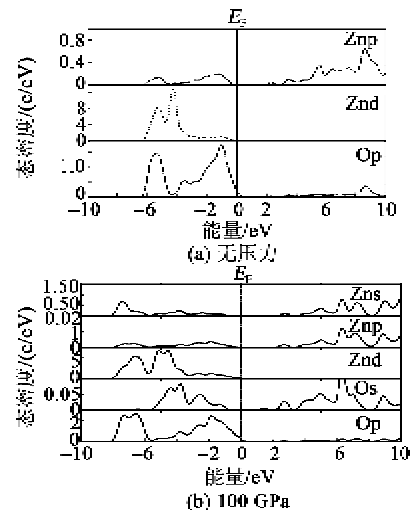


图 6 不同压力条件下 ZnO 各原子的态密度

间也有相互作用。外加压力为 100 GPa 时 ZnO 价带顶的能级主要由 Os 电子、Op 电子和 Znd 电子形成, Zns 电子、Znp 电子和 Os 电子形成, 且它们形成的能级之间有相互作用, 并且形成电子局域化。压力下原子间距缩小, 电子产生的能级接近, 他们之间产生更强的相互作用。

图 7 为计算所得不同外加压力条件下, ZnO 的 Zn、O 原子的各电子态电荷分布情况。由结果可看出, 随着外加压力的增大, Zn 原子 d 态电子数量基本不变, 而 s 能态减小电子, p 态增加电子, 压力产生了电子在不同态之间的转移; 而随着外加压力的增大, O 原子 s 态减少电子, p 态增加电子, 高压下产生了电子在不同量子态间的转移。由此可看出, 外界压力改变 ZnO 的电子状态, 载流子输运的过程因此将得到调制。

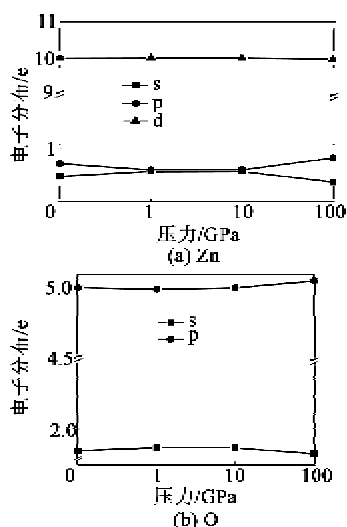


图 7 不同压力条件下 ZnO 的电荷分布

3 结束语

在平面波密度泛函理论第一性原理计算的基础上研究了不同压力条件下纤锌矿结构 ZnO 的晶格结构和电子结构。随外压力的增加, ZnO 的晶格参数和 Zn—O 键长先增大后逐渐减小, 晶胞纵横轴长之比逐渐增大, 晶格对称性保持不变; 带隙类型在所在压力条件下均为直接带隙, 其宽度随外压力增加先降低后逐渐增大, 零压力下其直接带隙为 0.908 eV, 在相对大压力 100 GPa 下其直接带隙达 0.993 eV; 费米能级附近的态密度随压力增加有增大的趋势, 载流子浓度随压力增加有增大的趋势, 电子局域化随外压力增大而增强的趋势明显。分析结果表明, 随着外压力的增加, ZnO 费米能级下方

附近的载流子有效质量先增大后减小; 导带的载流子有效质量均较小。外界加力还改变了 ZnO 体系中的电子的分布情况。压力可调整 ZnO 的电子状态并调控其电学性能。

参考文献:

- [1] ÖZGÜRÜ, ALIVOV Y I, LIU C, et al. A comprehensive review of ZnO materials and devices [J]. J Appl Phys, 2005, 98: 041301.
- [2] OHTAKI M, TSUBOTA, T EGUCHI K. High temperature thermoelectric properties of $(\text{Zn}_{1-x}\text{Al}_x)\text{O}$ [J]. J Appl Phys, 1996, 79: 1816.
- [3] ZHOU M, LI J F, KITA T. Nanostructured $\text{Ag-Pb}_m\text{SbTe}_{m+2}$ system bulk materials with enhanced thermoelectric performance [J]. J Am Chem Soc, 2008, 130: 4527.
- [4] LIU J, WANG C L, SU W B, et al. Enhancement of thermoelectric efficiency in oxygen-deficient $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{TiO}_3$ ceramics [J]. Appl Phys Lett, 2009, 95: 102110.
- [5] PEI Y, WANG H, SNYDER G J. Band Engineering of Thermoelectric Materials [J]. Adv Mater, 2012 (24): 6125.
- [6] ZHANG F P, LU Q M, ZHANG X, et al. Electrical transport properties of CaMnO_3 thermoelectric compound: a theoretical study [J]. J Phys Chem Solids, 2013, 174: 859.
- [7] DENG S K, TANG X F, LI P, et al. High temperature thermoelectric transport properties of p-type $\text{Be}_2\text{Ge}_{18}\text{Al}_2\text{Ge}_{32-x}$ type-I clathrates with high performance [J]. J Appl Phys, 2008, 103: 073503.
- [8] FERGUS J F. Oxide materials for high temperature thermoelectric energy conversion [J]. J Euro Ceram Soc, 2012, 32: 525.
- [9] ZHANG F P, ZHANG X, LU Q M, et al. Preparation and high temperature thermoelectric properties of $\text{Ca}_{3-x}\text{Ag}_x\text{Co}_4\text{O}_{9+\delta}$ oxides [J]. Solid State Ionics, 2011, 201: 1.
- [10] FENG H, ZHANG L, LIN W W, et al. Research progress in ZnO single-crystal: growth, scientific understanding, and device applications [J]. Chin Sci Bull, 2014, 59: 1235.
- [11] QU X, WANG W, LV S, et al. Thermoelectric properties and electronic structure of Al-doped ZnO [J]. Solid State Commun, 2011, 151: 332.
- [12] WANG V, MA D, JIA W. Structural and electronic properties of hexagonal ZnO: a hybrid functional study [J]. Solid State Commun, 2012, 152: 2045.
- [13] PAYNE M C, TETER M P, ALLAN D C, et al. Iterative minimization techniques for abinitio total-energy calculations- molecular-dynamics and conjugate gradients [J]. Rev Modern Phys, 1992, 64: 1045.
- [14] ZHANG F P, ZHANG X, LU Q M, et al. Electronic structure and thermal properties of doped CaMnO_3

- system[J]. *J Alloys Compd*, 2011, 509: 4171.
- [15] PENG H, WANG C, LI J, et al. Electronic and lattice vibrational properties of BaSi₂ from density functional theory calculations[J]. *J Electron Mater*, 2011, 40: 620.
- [16] LI J C, WANG C L, WANG M X, et al. Vibrational and thermal properties of small diameter silicon nanowires [J]. *J Appl Phys*, 2009, 105: 043503.
- [17] 张飞鹏, 曾宏, 路清梅, 等. ZnO 氧化物的电子结构与热学性能的研究[J]. *功能材料与器件学报*, 2013, 19(2): 63.
ZHANG Feipeng, ZENG Hong, LU Qingmei, et al. Electronic structure and thermal properties of ZnO oxide[J]. *Journal of Functional Materials and Devices*, 2013, 19(2): 63.
- [18] 解研, 罗莹, 刘绍军. 单向压力对碳纳管(6,6)晶体电子结构的影响[J]. *物理学报*, 2008, 57(7): 4364.
XIE Yan, LUO Ying, LIU Shaojun. The effects of the uniaxial pressure on electronic structure of the (6,6) single-walled carbon nanotube crystal [J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, 57(7): 4364.
- [19] 焦照勇, 杨继飞, 张现周, 等. 闪锌矿 GaN 弹性性质、电子结构和光学性质外压压力效应的理论研究[J]. *物理学报*, 2011, 60(11): 117103.
JIAO Zhaoyong, YANG Jifei, ZHANG Xianzhou, et al. Theoretical investigation of elastic, electronic and optical properties of zinc-blende structure GaN under high pressure[J]. *Acta Physica Sinica*, 2011, 60(11): 117103.
- [20] 李春霞, 党随虎, 张可言, 等. 压力对 CdS 电子结构和光学性质的影响[J]. *光学学报*, 2011, 31(6): 0616004.
LI Chunxia, DANG Suihu, ZHANG Keyan, et al. Influence of pressure effect on CdS electronic structure and optical properties [J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, 31(6): 0616004.
- [21] 张威虎, 张富春, 张志勇, 等. 压力下纤锌矿 ZnS 电子结构的第一性原理研究[J]. *材料导报*, 2006, 20(9): 128.
ZHANG Weihu, ZHANG Fuchun, ZHANG Zhiyong, et al. The first principle study of electronic structure properties of ZnS [J]. *Materials Reviews*, 2006, 20(9): 128.
- [22] 罗礼进, 仲崇贵, 江学范, 等. Heusler 合金 Ni₂MnSi 的电子结构、磁性、压力响应及四方相变的第一性原理研究[J]. *物理学报*, 2010, 59(1): 521.
LUO Lijin, ZHONG Chonggui, JIANG Xuefan, et al. A first-principles study of electronic structure, magnetism, response to pressure and tetragonal distortions of Ni₂MnSi Heusler alloy[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, 59(1): 521.
- [23] 韦金明, 张飞鹏, 张久兴. Cu 掺杂对 ZnO 氧化物电子结构与电输运性能的影响[J]. *量子电子学报*, 2014, 31(3): 372-378.
WEI Jinming, ZHANG Feipeng, ZHANG Jiuxing. Effects of Cu doping on electronic structure and electrical transport properties of ZnO oxide [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics*, 2014, 31(3): 372-378.
- [24] 余小英, 李凡生, 张飞鹏, 等. 同价 Mg 置换对 ZnO 氧化物电子结构与电性能的影响[J]. *高压物理学报*, 2015, 29(2): 129.
YU Xiaoying, LI Fansheng, ZHANG Feipeng, et al. Effects of Mg doping on electronic structure and electrical properties of ZnO oxide [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2015, 29(2): 129.

(上接第 876 页)

- [9] 钱华明, 黄蔚, 葛磊, 等. 基于四元数平方根容积卡尔曼滤波的姿态估计[J]. *北京航空航天大学学报*, 2013, 39(5): 646-649.
QIAN Huaming, HUANG Wei, GE Lei, et al. Attitude estimation based on quaternion square-root cubature Kalman filter [J]. *Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics*, 2013, 39(5): 646-649.
- [10] 赵利强, 罗达灿, 王建林, 等. 自适应强跟踪容积卡尔曼滤波算法[J]. *北京化工大学学报: 自然科学版*, 2013, 40(3): 98-103.
ZHAO Liqiang, LUO Dacan, WANG Jianlin, et al. An adaptive strong tracking cubature Kalman filter [J]. *Journal of Beijing University of Chemical Technology: Natural Science*, 2013, 40(3): 98-103.
- [11] HUBER P J. Robust statistics[M]. Berlin, Springer Berlin Heidelberg, 2011.
- [12] CRASSIDIS J L, MARKLEY F L. Attitude estimation using modified rodriques parameters[J]. *Proceedings of the Flight Mechanics/Estimation Theory Symposium, (NASA/CP-1996-3333)* NASA-Goddard Space Flight Center, Greenbelt, MD, 1996: 71-83.
- [13] CRASSIDIS J L, Markley F L. Unscented filtering for spacecraft attitude estimation[J]. *Journal of guidance, control, and dynamics*, 2003, 26(4): 536-542.
- [14] CHANG L, HU B, CHANG G. Modified unscented quaternion estimator based on quaternion averaging [J]. *Journal of Guidance, Control, and Dynamics*, 2013: 1-4.
- [15] CHANG L, HU B, CHANG G, et al. Robust derivative-free Kalman filter based on Huber's M-estimation methodology[J]. *Journal of Process Control*, 2013, 23(10): 1555-1561.
- [16] CHANG L, HU B, CHANG G, et al. Huber-based novel robust unscented Kalman filter[J]. *Science, Measurement & Technology, IET*, 2012, 6(6): 502-509.