

# 基于第一性原理的SiO<sub>2</sub>晶体的光学性能研究

## —— $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 和 $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的光学性能对比分析

安婷雯<sup>1</sup>, 封文江<sup>1</sup>, 高岩<sup>2</sup>, 吴闯<sup>2</sup>, 陈秀艳<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>沈阳师范大学物理科学与技术学院, 辽宁 沈阳

<sup>2</sup>沈阳师范大学实验教学中心, 辽宁 沈阳

收稿日期: 2023年4月14日; 录用日期: 2023年5月23日; 发布日期: 2023年5月30日

### 摘要

SiO<sub>2</sub>具有制备简单、粒径可调、光学透明性和化学稳定性等优异性能, 作为一种可改性的光电材料, 以其优异的性能受到越来越多的关注, 在光电传感器、光信息处理和存储装置、光通信及激光器拉曼晶体等领域拥有广阔的前景。本文应用第一性原理计算模拟软件Material Studio的CASTEP模块构建了 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体和 $\beta$ -SiO<sub>2</sub>晶体, 并对其几何进行优化使其达到稳定, 分析了压力对晶格常数的影响, 在514.5 nm激光入射下, 分析了两种晶体的光学性能, 结果表明,  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体和 $\beta$ -SiO<sub>2</sub>晶体对光的反射、折射和小光系数均是等价的, 而对于激光拉曼散射的能力差别很大,  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体的拉曼频移主要集中在200 cm<sup>-1</sup>范围内,  $\beta$ -SiO<sub>2</sub>晶体的拉曼频移主要集中在1000 cm<sup>-1</sup>~1300 cm<sup>-1</sup>范围内, 随着压力的增加, 两种晶体的拉曼谱线频移量均增大。本文的研究拓宽了SiO<sub>2</sub>晶体在光学元件上的应用, 为拉曼晶体提供了更多的选择性, 对实验提供了更多理论支持。

### 关键词

$\alpha$ -SiO<sub>2</sub>,  $\beta$ -SiO<sub>2</sub>, 第一性原理, 光学性能

# Optical Properties of SiO<sub>2</sub> Crystals Based on the First Principles

## —Comparative Analysis of Optical Properties of $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> and $\beta$ -SiO<sub>2</sub> Crystals

Tingwen An<sup>1</sup>, Wenjiang Feng<sup>1</sup>, Yan Gao<sup>2</sup>, Chuang Wu<sup>2</sup>, Xiuyan Chen<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>College of Physics Science and Technology, Shenyang Normal University, Shenyang Liaoning

<sup>2</sup>Experimental Teaching Center, Shenyang Normal University, Shenyang Liaoning

Received: Apr. 14<sup>th</sup>, 2023; accepted: May 23<sup>rd</sup>, 2023; published: May 30<sup>th</sup>, 2023

\*通讯作者。

## Abstract

$\text{SiO}_2$  has excellent properties such as simple preparation, adjustable particle size, optical transparency and chemical stability. As a kind of modified photoelectric material,  $\text{SiO}_2$  has attracted more and more attention for its excellent performance. It has broad prospects in the fields of photoelectric sensors, optical information processing and storage devices, optical communication and laser Raman crystals. In this paper,  $\alpha\text{-SiO}_2$  crystals and  $\beta\text{-SiO}_2$  crystals are constructed by the CASTEP module of the first-principles calculation simulation software Material Studio, and geometric optimization is carried out to make them stable. The influence of pressure on lattice constant is analyzed, and the optical properties of the two crystals are analyzed under the incident laser light of 514.5 nm laser. The results show that the light reflection, refraction and small light coefficient of  $\alpha\text{-SiO}_2$  crystals and  $\beta\text{-SiO}_2$  crystals are equivalent, but the Raman scattering ability of  $\alpha\text{-SiO}_2$  crystals is very different. The Raman frequency shift of  $\alpha\text{-SiO}_2$  crystals is mainly concentrated in the range of  $200\text{ cm}^{-1}$ . The Raman frequency shift of  $\beta\text{-SiO}_2$  crystals is mainly concentrated in the range of  $1000\text{ cm}^{-1}\sim 1300\text{ cm}^{-1}$ , and with the increase of pressure, the Raman line frequency shift of both crystals increases. The research in this paper broadens the application of  $\text{SiO}_2$  crystals in optical components, provides more selectivity for Raman crystals, and provides more theoretical support for experiments.

## Keywords

$\alpha\text{-SiO}_2$ ,  $\beta\text{-SiO}_2$ , The First Principles, Optical Properties

Copyright © 2023 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

$\text{SiO}_2$  作为当今人类最热门的应用材料之一, 作为电子信息产业、智能制造装备、太阳能以及高效节能等诸多尖端领域的关键性基础原料[1] [2] [3], 受到越来越多的关注, 尤其在光电传感器、光信息处理和存储装置、光通信及激光等领域中拥有广阔的前景[4] [5] [6]。在光学投影光刻中, 将图案通过一系列透镜投射到光刻胶层上, 对其进行显影和蚀刻, 其中  $\text{SiO}_2$  晶体作为照明和投影的光学元件, 推动了新型光刻工具的发展[7]; 在硅光电池表面生长一层二氧化硅膜, 可以有效防止光的反射, 提高光电池的转换效率和短路电流[8];  $\text{SiO}_2$  晶体光学元件由于其高紫外线透明度、高损伤阈值和出色表面质量等特点, 被用于研究惯性约束核聚变的高能激光系统[9]。因此,  $\text{SiO}_2$  晶体性能的研究对其应用具有至关重要的作用, 2011 年, 曹娟等[10]对  $\text{SiO}_2$  纳米线中拉曼光谱进行了理论研究, 对硅原子数为 12 的单链和双链结构采用 Gaussian 03 软件的密度泛函 RB3LYP 方法结合基组 6-31G(d)优化结构和计算频率,  $(\text{SiO}_2)_n$  单链结构的拉曼最强峰位于  $809\text{ cm}^{-1}$  附近, 次强峰位于  $1283\text{ cm}^{-1}$  附近, 再次, 第三峰值位于在  $50\text{ cm}^{-1}\sim 150\text{ cm}^{-1}$  附近。对于双链结构, 最强峰位于  $760\text{ cm}^{-1}$  附近, 其次为  $400\text{ cm}^{-1}$  和  $450\text{ cm}^{-1}$  附近。2000 年, 祖恩东等[11]对  $\text{SiO}_2$  类玉石的拉曼光谱进行了测量, 发现紫水晶、玛瑙欧泊在  $1066\text{ cm}^{-1}$ 、 $800\text{ cm}^{-1}$  和  $400\text{ cm}^{-1}$  的由于结晶度不同, 峰值分裂程度和强度不同。由于  $\text{SiO}_2$  晶体种类较多, 不同结构以及不同种类均具有不同的光学性能, 此外,  $\text{SiO}_2$  晶体的光电性能也极易受到温度、压强等外部环境的影响, 甚至在不同温度和压力共同作用下,  $\text{SiO}_2$  可以实现不同结构形式的变化, 从而改变自身的性能[12] [13] [14] [15]。但目前, 包

括上述文章, 均没有讨论微观  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体和  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体, 及其随外界环境的光电性能变化。因此, 研究不同外部环境作用下 SiO<sub>2</sub> 晶体结构与性能对其在实际应用中有重要的参考价值。本文应用 MS (Material Studio) 软件模拟了不同温度和压力水平下的  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体、 $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的结构特性, 在此基础上, 计算了 0 cm<sup>-1</sup>~1400 cm<sup>-1</sup> 范围内的光学性能, 为 SiO<sub>2</sub> 晶体的后续实验研究提供可参考的理论依据。

## 2. 理论基础及模型建立

### 2.1. 理论基础

目前第一性原理计算方法中的密度泛函理论方法因其高效精准的特点在材料的结构和性能预测方面发挥巨大作用该方法是基于薛定谔方程:

$$\hat{H}\psi(\bar{r}, \bar{R}) = E\psi(\bar{r}, \bar{R}) \quad (1)$$

应用量子力学时直借助基本常量和默写合理的近似而不依赖所研究材料的实验数据所进行的模拟计算。

密度泛函理论(DFT)是为多粒子体系基态性质研究而产生的理论, 用粒子密度函数来描述体系的基态物理性质, 可应用于原子、分子和凝聚态物质的分析, 不考虑单个电子作用, 在电子密度、结构以及总能量的计算上有关键效应。其中, Hohenberg-Kohn 定理包含两条定理, 第一条定理指出多体量子体系的基态波函数  $\psi_0(\{\bar{r}\})$  和电子密度  $\psi_0(n_0(\bar{r}))$  是一一对应的, 即:

$$\psi_0(\{\bar{r}\}) = \psi_0(n_0(\bar{r})) \quad (2)$$

第二条定理引入能量泛函, 结合第一条定理, 可以确定基态波函数是由基态电子密度唯一确定的, 此时对应的体系能量为最小值。能量是由动能、势能和电子因为原子核的影响而在外部场中运动的能量组成, 表达式为:

$$E[n(\bar{r})] = T[n(\bar{r})] + U[n(\bar{r})] + V_{ext}[n(\bar{r})] \quad (3)$$

Kohn 和 Sham 为处理有电子相互作用的非均匀体系, 进一步扩展了 Hohenberg-Kohn 定理。通过对非相对论形式的哈密顿量的变换得到单电子形式的方程组, 即 Kohn-Sham 方程:

$$\{-\nabla^2 + V_{KS}[n(\bar{r})]\}\psi_i(\bar{r}) = E_i\psi_i(\bar{r}) \quad (4)$$

$$V_{KS}[n(\bar{r})] = V(\bar{r}) + \int d\bar{r}' \frac{n(\bar{r}')}{|\bar{r} - \bar{r}'|} + \frac{\delta E_{xc}[\bar{r}]}{\delta n(\bar{r})} \quad (5)$$

$$n(\bar{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\bar{r})|^2 \quad (6)$$

在密度泛函理论(DFT)中交换关联泛函占有重要地位, 通常采用局域密度近似(LDA)或广义梯度近似(GGA)来处理交换关联势, LDA 是用一均匀电子气的交换关联能密度代替非均匀电子气的交换关联能密度, 近似忽略了电子气不均匀对单电子交换关联能的影响, 可表示为:

$$E_{xc}^{LAD}[n(\bar{r})] = \int \varepsilon_{xc}[n(\bar{r})]n(\bar{r})d\bar{r} \quad (7)$$

GGA 在克服 LDA 的局限性之外, 还可以提供比 LAD 更好的能源性能, GGA 增加了电荷密度的非局域梯度项, 从而纠正了系统电子密度的不均匀情况。其梯度近似表达式为:

$$E_{xc}^{GGA}[n(\bar{r})] = \int n(\bar{r})\varepsilon_{xc}[n(\bar{r})]d\bar{r} + E[n(\bar{r})]|\nabla n(\bar{r})| \quad (8)$$

## 2.2. 模型建立

在密度泛函理论(DFT)的基础上,采用 Materials Studio 6.0 软件通过 CASTEP 模块进行计算。 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>、 $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的晶体结构如图 1 所示,  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>、 $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体均包含 9 个原子, 空间群分别为 152(P312)和 180(P6222)在  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 中, 六个氧原子位置坐标为(0.4108、0.2739、0.2201), 三个硅原子位置坐标为(0.4661、0.0000、0.3333)。在  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 中, 氧原子和硅原子的位置坐标分别为(0.2039、0.4078、1.5000)和(0.500、0.5000、0.333)。  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 在 0 GP 下的优化晶格参数为  $a = b = 5.0621 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.49535 \text{ \AA}$ , 该结果与 Yue 等人在密度泛函理论下通过 Vienna ab initio simulation package (VASP)的计算结果  $a = b = 4.916 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.4054 \text{ \AA}$  相近, 可见本文优化后的晶格参数以及后续计算结果具有一定的参考性。 $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的优化晶格为  $a' = b' = 5.10360 \text{ \AA}$ ,  $c' = 5.58330 \text{ \AA}$ 。

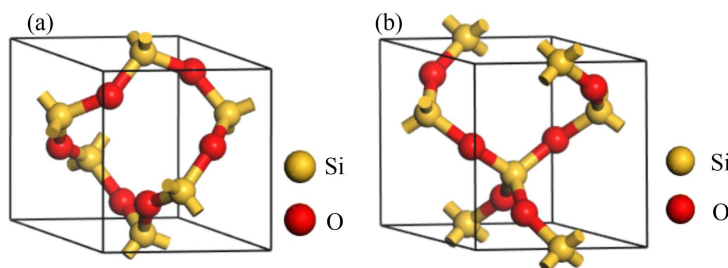


Figure 1. Crystal of SiO<sub>2</sub>; (a)  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>; (b)  $\beta$ -SiO<sub>2</sub>

图 1. SiO<sub>2</sub> 晶体结构; (a)  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>; (b)  $\beta$ -SiO<sub>2</sub>

入射光源为 514.5 nm 激光, 对晶体进行优化, 通过计算带隙及晶格常数选择合适的交换关联函数, 比较广义梯度近似(GGA)和局域密度近似(LDA)所得计算值, 发现 GGA 计算的带隙及晶格参数与实验值更相近, 再用 GGA 的不同交换关联函数进行计算, 对比 PW91 及 PBE 等, 发现 PW91 的计算结果更为准确, 因此, 确定交换关联函数为 GGA-PW91。通过收敛性测试, 确定截断能为 750 eV。k 网格选取为  $4 \times 3 \times 3$ , 总能量收敛精度为  $1.0 \times 10^{-5} \text{ eV/atom}$ , 原子最大位移收敛标准为  $0.001 \text{ \AA}$ 。每个原子上的受力均小于  $0.03 \text{ eV/nm}$ , 内应力收敛精度为  $0.005 \text{ GPa}$ 。

## 3. 压力对晶格常数的影响

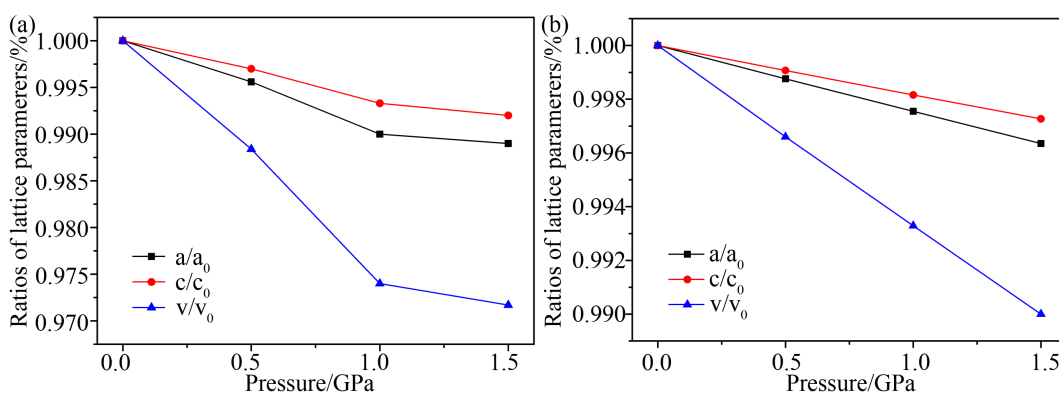


Figure 2. The lattice parameters of SiO<sub>2</sub> crystal; (a)  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>; (b)  $\beta$ -SiO<sub>2</sub>

图 2. SiO<sub>2</sub> 晶体的晶格参数; (a)  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>; (b)  $\beta$ -SiO<sub>2</sub>

当对晶体施加压力时, 晶体的结构和晶格参数会发生变化。当增加压力为 0.5 GPa、1.0 GPa、1.5 GPa 后,  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>、 $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体晶格参数变化如图 2 所示,  $a$ ,  $c$ ,  $v$  为施加压力后的晶格参数及体积,  $a_0$ ,  $c_0$ ,

$v_0$  为原始的晶格参数及体积。可以看出，随着压力的增加，所有的参数均降低，这表明原子之间变得更紧密，原子彼此的相互作用力变大。通过比较  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>、 $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体参数，可以发现  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体可压缩性更大。

#### 4. 光学性质对比分析

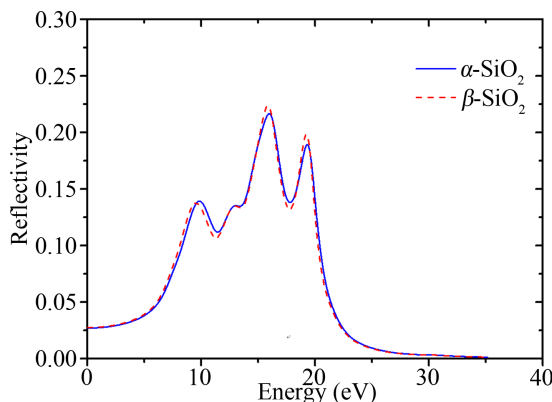


Figure 3. The reflectivity of SiO<sub>2</sub> crystal

图 3. SiO<sub>2</sub> 晶体的反射率

图 3 为  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体和  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的反射率，从图中可以看出， $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体和  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体反射率变化曲线相似。随着能量的增加，反射率也增加，在能量为 9.8 eV、16.5 eV 和 20 eV 处出现峰值，分别为 0.14、0.22 和 0.20。在 22 eV 以上能量范围内，反射率随着能量增大而减小并逐渐趋于 0。二者虽然结构不同，但是在紫外线区域对光的反射率并没有明显差别，因此，在作为反射紫外线材料时，两种晶体都可以选用。

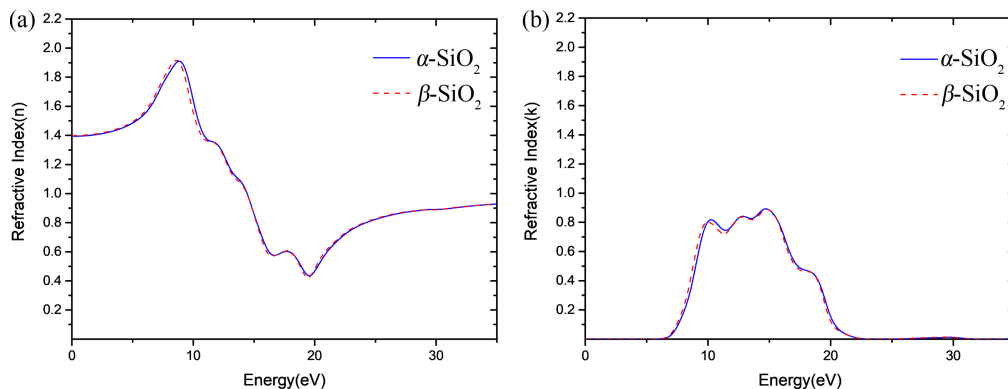
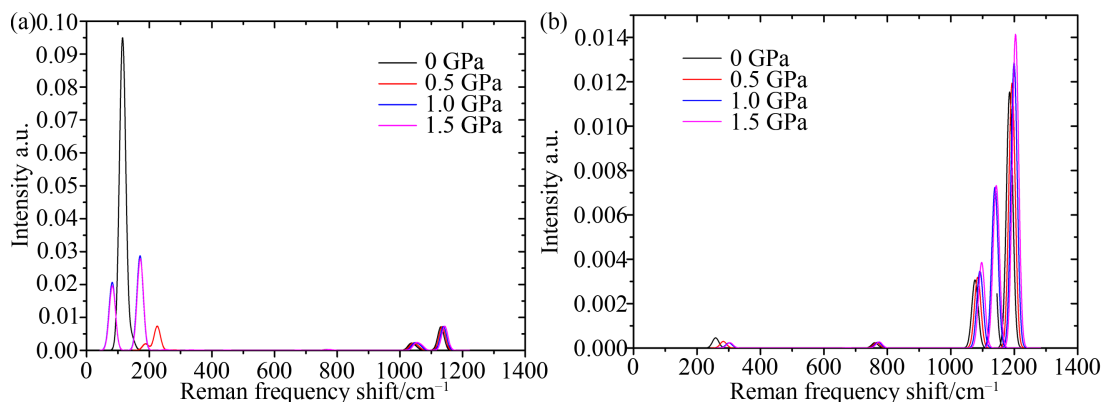


Figure 4. Refractive index and extinction coefficient of SiO<sub>2</sub> crystal; (a) Refractive index; (b) Extinction coefficient

图 4. SiO<sub>2</sub> 晶体的折射率与消光系数; (a) 折射率; (b) 消光系数

同样的方法，经过计算， $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体和  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的折射率和消光系数如图 4。 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体和  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的折射率曲线变化相似，从图中可知，两者静态折射率相同，均为 1.39，折射率在低能区随着能量增大而增大，在 8.6 eV 附近增加至峰值 1.92，而后随着能量增大而降低，在 19.4 eV 达到最小值 0.42，之后有所升高并在能量大于 25 eV 后趋于稳定。可见  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体和  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体对紫外光折射率最强。 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体和  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的消光系数曲线变化也极为相似，消光系数变化的能量范围在 7 eV~23 eV，其中 10 eV~16 eV 能量区间消光系数最大。最高达到 0.92，可见晶体对紫外区域的光产生较强吸收，SiO<sub>2</sub>

的两种不同结构对其折射率和消光系数影响不大。



**Figure 5.** Raman spectrum of SiO<sub>2</sub> crystal; (a) 673 K under different pressures of  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>; (b) 1273 K under different pressures of  $\beta$ -SiO<sub>2</sub>

**图 5.** SiO<sub>2</sub> 晶体的拉曼谱; (a) 673 K 不同压力下  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>; (b) 1273 K 不同压力下  $\beta$ -SiO<sub>2</sub>

晶体的拉曼谱如图 5 所示。SiO<sub>2</sub> 晶体的谱带峰值对应振动模式为，频率在 200 cm<sup>-1</sup> 左右的峰对应氧原子沿 Si-Si 方向的对称伸缩振动[16]，300 cm<sup>-1</sup>~600 cm<sup>-1</sup> 的峰对应 Si-O 弯曲振动，600 cm<sup>-1</sup>~800 cm<sup>-1</sup> 的峰对应 Si-O-Si 对称伸缩振动，1000 cm<sup>-1</sup>~1200 cm<sup>-1</sup> 的峰对应 Si-O 非对称伸缩振动[11]。由图可知，在温度为 400℃ (673 K) 压力为 0 GPa 时， $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体拉曼光谱有三个拉曼峰，最高峰位于 110 cm<sup>-1</sup> 处，随着压力的增加，低频率的拉曼峰分成两个，但强度减弱。 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体拉曼光谱集中在 0 cm<sup>-1</sup>~200 cm<sup>-1</sup> 低频率范围，由氧原子沿 Si-Si 方向的对称伸缩振动提供。 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体在 1000 cm<sup>-1</sup>~1200 cm<sup>-1</sup> 频率处还有两个弱峰，由 Si-O 非对称伸缩振动提供。从 0 GPa 到 1.5 GPa 的压力下，高频处拉曼光谱随着压力增加向高频移量增加。1273 K 不同压力下  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体拉曼光谱完全不同于  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的拉曼光谱，拉曼频移主要在 1000 cm<sup>-1</sup>~1200 cm<sup>-1</sup> 范围，在高频率范围内有三个峰，最高峰出现在 1200 cm<sup>-1</sup> 处，均由 Si-O 非对称伸缩振动提供。在 300 cm<sup>-1</sup> 和 800 cm<sup>-1</sup> 处存在两个弱峰，分别由 Si-O 弯曲振动和 Si-O-Si 对称伸缩振动提供， $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体在高频率谱线强度大于  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的拉曼光谱，说明  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 的振动能级较宽。

## 5. 结论

总之，本文应用第一性原理构建了  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 和  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体模型，计算了压力对晶格常数的影响，并对比分析了两种晶体的光学性能，发现  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体和  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的反射率、折射率及消光系数的峰值及变化趋势相近，均对紫外区域的光有良好的反射、折射及吸收性能。但  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体和  $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的拉曼光谱在不同压力下受结构特性影响最为明显， $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体在低频率范围内拉曼谱强度高，谱线主要由氧原子沿 Si-Si 方向的对称伸缩振动提供， $\beta$ -SiO<sub>2</sub> 晶体拉曼谱在高频率范围强度大，由 Si-O 非对称伸缩振动提供，该结论为后续深入研究提供了理论基础。

## 基金项目

本文工作受到沈阳师范大学研究生教学改革项目(YJSJG320210102)、沈阳师范大学教学改革项目(JG2021-YB063)、教育部产学合作协同育人项目(220502116230206, 220606517061317)的支持。

## 参考文献

- [1] Knall, J., Engholm, M., Boilard, T., Bernier, M., Vigneron, P.B., Yu, N. and Dignonnet, M.J.F. (2021) Radiation-Balanced Silica Fiber Laser. *Optica*, **8**, 830-833. <https://doi.org/10.1364/OPTICA.425115>

- [2] Chen, X., Feng, W., Zhang, G. and Gao, Y. (2019) Raman Spectra of Quartz and  $Pb^{4+}$ -Doped  $SiO_2$  Crystals at Different Temperature and Pressure. *Crystals*, **9**, Article No. 569. <https://doi.org/10.3390/cryst9110569>
- [3] Knall, J.M. and Digonnet, M.J. (2021) Design of High-Power Radiation-Balanced Silica Fiber Lasers with a Doped Core and Cladding. *Journal of Lightwave Technology*, **39**, 2497-2504. <https://doi.org/10.1109/JLT.2021.3053466>
- [4] Sun, S., Jia, B., Hu, H., Han, L., Liu, G., Gao, C. and Lu, P. (2019) Geometric and Optical Properties of Cluster Model of Yb-Doped Silica Optical Fiber. *Journal of Cluster Science*, **30**, 1205-1210. <https://doi.org/10.1007/s10876-019-01603-x>
- [5] Trukhin, A.N., Antuzevics, A., Golant, K. and Griscom, D.L. (2017) Luminescence of Phosphorus Doped Silica Glass. *Journal of Non-Crystalline Solids*, **462**, 10-16. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2017.02.002>
- [6] Guan, X., Zhang, R., Jia, B., Chen, X., Yan, B., Peng, G.D. and Lu, P. (2019) Electronic and Optical Properties of Ge-Doped Silica Optical Fiber. *Modern Physics Letters B*, **33**, Article ID: 1950150. <https://doi.org/10.1142/S0217984919501501>
- [7] Sewell, H. and Mulken, J. (2009) Materials for Optical Lithography Tool Application. *Annual Review of Materials Research*, **39**, 127-153. <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-082908-145309>
- [8] Bitnar, B. (2003) Silicon, Germanium and Silicon/Germanium Photocells for Thermophotovoltaics Applications. *Semiconductor Science and Technology*, **18**, S221. <https://doi.org/10.1088/0268-1242/18/5/312>
- [9] Baisden, P.A., Atherton, L.J., Hawley, R.A., Land, T.A., Menapace, J.A., Miller, P.E. and Wong, L.L. (2016) Large Optics for the national Ignition Facility. *Fusion Science and Technology*, **69**, 295-351. <https://doi.org/10.13182/FST15-143>
- [10] 曹娟, 张兆慧, 徐灿.  $SiO_2$  纳米线中拉曼光谱的理论研究[J]. 原子与分子物理学报, 2011, 28(1): 31-35.
- [11] 祖恩东, 李茂材, 张鹏翔. 二氧化硅类玉石的显微拉曼光谱研究[J]. 昆明理工大学学报, 2000, 25(3): 77-79.
- [12] Liu, M., Lu, P.F., Yang, Y., Wu, L.Y., Su, R. and Chen, J. (2015) Structural and Optical Properties of Point Defects in  $\alpha$ - $SiO_2$  Cluster. *Communications in Theoretical Physics*, **64**, Article No. 244. <https://doi.org/10.1088/0253-6102/64/2/244>
- [13] Mankad, V. and Jha, P.K. (2016) First-Principles Study of Water Adsorption on  $\alpha$ - $SiO_2$  [110] Surface. *AIP Advances*, **6**, Article ID: 085001. <https://doi.org/10.1063/1.4960455>
- [14] 郭杰荣, 马磊. 石英  $\alpha$ - $SiO_2$  晶体基本特性的原子模拟[J]. 材料科学, 2019, 9(4): 355-360.
- [15] Wang, C., Guo, X., Zhang, S., Qi, Y. and Gao, S. (2023) Analysis of the Electronic Structure of  $\beta$ - $SiO_2$  Intrinsic Defects Based on Density Functional Theory. *Materials Today Communications*, **35**, Article ID: 105554. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.105554>
- [16] 张小芳. 一维二氧化硅纳米材料的光谱研究[D]: [硕士学位论文]. 兰州: 兰州大学, 2008.