

γ -AlON 晶体电子结构和光学性质研究*

潘磊¹⁾ 卢铁城^{1)2)†} 苏锐¹⁾ 王跃忠¹⁾ 齐建起^{1)‡} 付佳¹⁾ 张焱¹⁾ 贺端威³⁾

1) (四川大物理科学与技术学院, 成都 610064)

2) (四川大学辐射物理及技术教育部重点实验室, 成都 610064)

3) (四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2011 年 3 月 31 日收到; 2011 年 5 月 25 日收到修改稿)

本研究在基于第一性原理的密度泛函理论 (DFT) 框架下, 采用局域密度近似 (LDA) 和赝势平面波方法, 计算了平衡结构尖晶石型 γ -AlON 的态密度和光学性质参数. 结合表征电子结构的态密度, 分析了 γ -AlON 在 0—30 eV 范围内的复介电函数以及由其导出的折射率、反射谱、吸收谱等. 理论计算得出: γ -AlON 零频介电常数 $\epsilon_1(0) = 2.60$, 折射率 $n_0 = 1.61$, 在红外到近紫外以及 20.23 eV 以上的紫外波段, 其光吸收趋近于零, 表现为光学透明. 理论计算结果与相关实验数据相一致, 为 γ -AlON 在光学窗口及头罩材料等方面的应用提供了理论依据和参考.

关键词: γ -AlON, 第一性原理, 电子结构, 光学性质

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 78.20.-e, 78.20.Ci

1 引言

尖晶石型 AlON (γ -AlON) 是 Al_2O_3 -AlN 体系的一个重要的单相、稳定固溶体, 经高温烧结能够制备出具备良好力学、热学、机械和化学性能的透明陶瓷^[1,2]. 这种陶瓷材料从近紫外到红外波段都具有较高的光学透过率^[3], 而且与传统窗口和罩材料蓝宝石相比, 它可以更方便的加工成异形、大尺寸的各类透明陶瓷材料, 制备成本也相对较低, 成为耐高温可见及红外窗口和头罩的优选材料之一, 近几十年来受到国内外研究者的广泛关注.

目前, 对于 γ -AlON 的研究主要集中在其粉体合成及陶瓷制备的相关实验和理论研究^[4], 而对其固有性质的理论研究和可供参考的相关数据则较少. 据我们所知, 到目前为止只有 Chang 等人^[5] 和 Onyekwelu 等人^[6] 分别对 γ -AlON 进行了结构优化和力学性质的第一性原理研究. 然而, 作为一种十分重要的光电功能陶瓷材料, 有关 γ -AlON 电子结构和光学性质的理论计算却尚未见报道. 实验

方面, γ -AlON 还存在因结构复杂造成制备困难, 烧结温度较高致使制备成本偏高等问题, 因此理解这种氮氧化物的基本物理性质, 尤其是掌握其光学性质的相关数据, 对于促进 γ -AlON 的实验研究和进一步推广应用具有十分重要的意义.

第一性原理是解释和预测物质结构和性质的一种十分重要而有效的方法, 国内外已经有大量报道^[7,8] 证明其能够成功描述固体材料的光电性质. 针对 γ -AlON 研究中存在的上述问题, 本文采用基于第一性原理的赝势平面波方法, 对 γ -AlON 晶体的态密度、介电函数、折射率等光电性能参数进行了全面计算. 在电子态密度的基础上, 分析了 γ -AlON 的光谱形成机理以及各光谱之间的联系, 得到了 γ -AlON 从红外到远紫外区的一系列光学性质, 计算结果与已有的实验以及理论数据符合较好.

2 实验步骤和过程

采用铝热还原法, 以 γ - Al_2O_3 (纯度 99.99%)

* 国家自然科学基金 (批准号: 50872083), 航空科学基金 (批准号: 20100119003), 四川大学中央高校基本科研专项基金 (批准号: 2009SCU11126) 资助的课题.

† E-mail: lutiecheng@scu.edu.cn

‡ E-mail: qijianqi@scu.edu.cn

和 Al 粉 (纯度 99.9%) 为原料, 原料在 N_2 保护下球磨 24 h 后在真空气氛炉中经 1700 °C 高温煅烧, 得到了纯相 γ -AlON 粉体. 粉体经过球磨、烘干、过筛, 再采用干压后冷等静压的方法得到致密均匀的素坯. 最后, 将素坯置于高温真空气氛炉中在 N_2 气氛下于 1950 °C 保温 10 h, 制备出 γ -AlON 透明陶瓷. 采用日本岛津紫外可见分光光度计 (UV-2550) 测量了经抛光处理的 γ -AlON 透明陶瓷样品的吸收率.

3 理论模型和计算方法

3.1 理论模型

理想结构的 γ -AlON 属于 $Fd\bar{3}m$ 空间群, 计算中采用 MacCauley 提出的常数阴离子模型^[1] (constant-anion-model), 该体系包含 55 个原子, 组成为 $Al_{23}O_{27}N_5(5AlN \cdot 9Al_2O_3, 35.7 \text{ mol } \% AlN)$, 32 个阴离子格点由 27 个 O 原子和 5 个 N 原子占据, 8 个四面体中心和 16 个八面体中心由 15 个 Al 原子以及一个 Al 原子空位占据. 其中, 8 个四面体中心的 Al 中的 5 个 Al 原子有一个邻位 N 原子 (AlO_3N), 另外 3 个四面体中心 Al 原子邻位均为 O (AlO_4); 15 个八面体中心的 Al 中有 5 个 Al 原子有一个邻位 N 原子 (AlO_5N), 6 个 Al 原子有两个邻位 N 原子 (AlO_4N_2), 另外 4 个八面体中心 Al 原子邻位均为 O (AlO_6), 整个结构如图 1 所示.

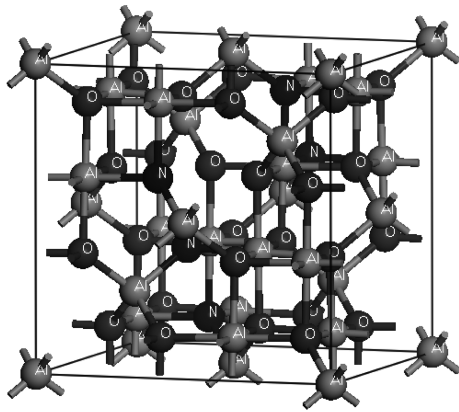


图 1: γ -AlON 结构示意图

3.2 计算方法

本文的所有计算采用基于密度泛函 (DFT)^[9] 理论的量子力学计算程序 VASP^[10,11] 完成. 其芯态用缀加投影波函数 (projector augmented wave,

PAW)^[12] 描述, 电子波函数用一系列平面波函数展开. 交换关联函数采用局域密度近似 (local density approximation, LDA). 计算初始建模采用实验晶格常数^[2]: $a = b = c = 0.795 \text{ nm}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. 平面波截止能设为 $E_{\text{cut}} = 500 \text{ eV}$, 迭代过程收敛精度为 $1.0 \times 10^{-5} \text{ eV/atom}$. 总能量和电荷密度在对布里渊区积分计算时使用 Monkhorst-Pack 方案^[13], 由于计算体系较大, 所有计算均采用 $5 \times 5 \times 5$ 的 K 点网格. 进一步增加平面波截止能和 K 点数目进行测试计算, 得到的结果差异非常小, 说明本计算中选取的参数设置是可靠的.

首先对晶胞理论模型进行几何结构优化, 确定平衡态晶格常数和原子位置, 力的收敛精度设为 $0.01 \text{ eV/\AA}$, 然后以优化的结构进行静态总能计算得到电荷密度, 再根据电荷密度进行非自洽计算得到电子态密度. 通过计算占据态和非占据态波函数矩阵元可以得到介电函数虚部 ε_2 , 再利用克拉默斯 - 克勒尼希 (Kramers-Krönig) 关系可求出介电函数实部 ε_1 , 进而导出折射率、吸收系数等其他光学常数. 计算和分析中所依据的理论公式^[14,15] 如下:

$$\varepsilon_2 = \frac{\pi}{\varepsilon_0} \left(\frac{e}{m\omega} \right)^2 \cdot \sum_{V,C} \int_{BZ} \frac{2d\mathbf{K}}{(2\pi)^3} |\mathbf{a} \cdot \mathbf{M}_{CV}|^2 \times \delta[E_C(\mathbf{K}) - E_V(\mathbf{K}) - \hbar\omega], \quad (1)$$

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{2e}{\varepsilon_0 m^2} \sum_{V,C} \int_{BZ} \frac{2d\mathbf{K}}{(2\pi)^3} \frac{|\mathbf{a} \cdot \mathbf{M}_{CV}(\mathbf{K})|^2}{[E_C(\mathbf{K}) - E_V(\mathbf{K})]} \times \frac{\hbar^3}{[E_C(\mathbf{K}) - E_V(\mathbf{K})]^2 - \hbar^2\omega^2}, \quad (2)$$

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{1/2} + \varepsilon_1 \right]^{1/2}, \quad (3)$$

$$k(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{1/2} - \varepsilon_1 \right]^{1/2}, \quad (4)$$

$$R(\omega) = \frac{[n(\omega) - 1]^2 + k^2(\omega)}{[n(\omega) + 1]^2 + k^2(\omega)}, \quad (5)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{2\omega k(\omega)}{c} = \frac{\varepsilon_2(\omega)\omega}{n(\omega)c}, \quad (6)$$

以上各式中, C, V 分别代表导带和价带, BZ 为第一布里渊区, K 为倒格矢, $|\mathbf{a} \cdot \mathbf{M}_{CV}(\mathbf{K})|^2$ 为动量跃迁矩阵元, $\mathbf{a}$ 为单位方向矢量, E_C , E_V 分别对应导带和价带的本征能级, $n(\omega)$, $n(k)$ 分别为折射率和消光系数, $R(\omega)$ 为反射系数, $\alpha(\omega)$ 为吸收系数.

4 结果和讨论

4.1 结构参数优化

为得到较稳定的 γ -AlON 结构模型, 在实验晶

格常数的基础上对原胞进行几何结构参数优化计算. 计算得到的稳定结构 γ -AlON 的晶格参数见表 1. 由于 Al 原子空位的引入, 导致初始结构发生一定晶格畸变, 使得体系对称性降低为 $P1$, 优化后的晶胞参数与实验值接近, 偏差在 1% 以内, 产生的结构畸变较小, 仍可视作立方对称结构.

表 1 结构优化后 γ -AlON 晶胞参数

物理参量	优化值	实验值 [2]	偏差/%
a/nm	0.791736	0.794600	0.36
b/nm	0.792868	0.794600	0.22
c/nm	0.791580	0.794600	0.38
$\alpha/(\circ)$	90.5019	90.0000	0.56
$\beta/(\circ)$	90.0948	90.0000	0.11
$\gamma/(\circ)$	90.3610	90.0000	0.40

4.2 电子结构

图 2 为 γ -AlON 的总态密度 (DOS) 及 N, O, Al 原子的分波态密度 (PDOS), 计算中 N 原子的 $2s^2p^3$, O 原子的 $2s^2p^4$ 及 Al 原子的 $3s^2p^1$ 为价电子, 取费米能级为坐标能量零点. 可以看出, 在 -15 —

-2.5 eV 的价带底区域, γ -AlON 的态密度主要由 O 的 2p 态电子和 Al 的 3s 态电子构成, O 的 2s 态电子和 Al 的 3p 态电子也有少量贡献; -2.5 —0 eV 的价带顶区域的态密度主要由 N 的 2p 态电子构成; 在 2.5 —11 eV 的导带区, γ -AlON 的态密度主要由 O 的 2p 态电子和 Al 的 3s 态电子构成; 从态密度得到的带隙宽度 $E_g = 2.52$ eV, 与文献 [6] 的计算结果十分接近, 但低于 French 的 X 射线光电子能谱实验值 6.2 eV^[16] 以及 Hartnett 的光学带隙实验值 4.59 eV^[3], 这是 DFT 存在的一个普遍性问题, 并不影响对其电子结构和光学性质的定性分析^[17,18].

根据态密度的计算结果可知, γ -AlON 的价带主要由 O 的 2p 态电子和 Al 的 3s 态电子构成, 导带主要由 O 的 2p 态电子和 Al 的 3s 态电子构成, γ -AlON 这种相对简单的电子结构决定了其稳定而优异的光学性能. 另外, 由于通常情况下的电子跃迁主要发生在带边附近, 而 γ -AlON 价带顶 (费米面附近) 的态密度主要由 N 的 2p 态电子构成, 故 γ -AlON 中的 N 原子的电子组态是影响体系光学性能的主要因素, 这一点有待进一步的理论和实验研究.

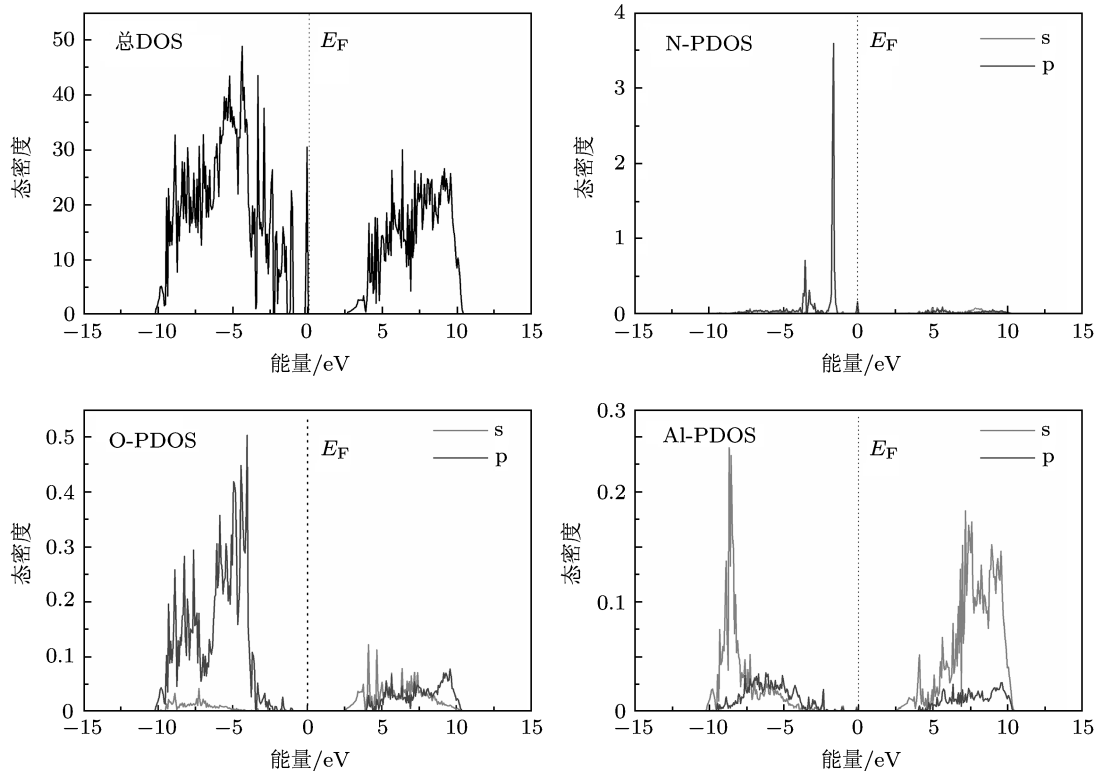


图 2 γ -AlON 的总态密度及 N, O, Al 的分态密度

4.3 光学性质

4.3.1 γ -AlON 复介电函数

晶体材料的介电函数是描述外电场作用下体系线性响应的一个二阶张量,也可由复介电函数 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ 描述,固体材料的光频响应信息可以由复介电函数得到^[19],其中虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 被认为是沟通带间跃迁微观物理过程和固体电子结构的桥梁,通过它可以得到其他光谱信息^[20].

图3是计算得到的 γ -AlON 的复介电函数随能量变化的曲线图,实部和虚部各有三条曲线,分别代表介电函数沿晶体三个主轴方向的分量,可以看出三条曲线基本重合,表明 γ -AlON 晶体沿三个晶轴方向上的光学性质相同,体现了 γ -AlON 晶体各向同性的特点. γ -AlON 的零频介电常数 $\varepsilon_1(0) = 2.60$, ε_1 分别在 ε_2 的上升沿和下降沿达到极大和极小值,在 11.83—17.94 eV 范围内 $\varepsilon_1 < 0$,从波矢方程 $\omega^2\varepsilon = c^2(K \cdot K)$ 可知, $\varepsilon_1 < 0$ 意味着波矢 K 为虚数,即此频域内光不能在其中传播; ε_2 呈先增大后减小的趋势,在 10.31 eV 处达到峰值,对应价带电子的带间跃迁,由于介电函数的虚部 ε_2 和材料的光学吸收性质直接相关,故从介电函数谱中可以预测: γ -AlON 在 5—15 eV 的光子能量范围内将会有较为强烈的光吸收.

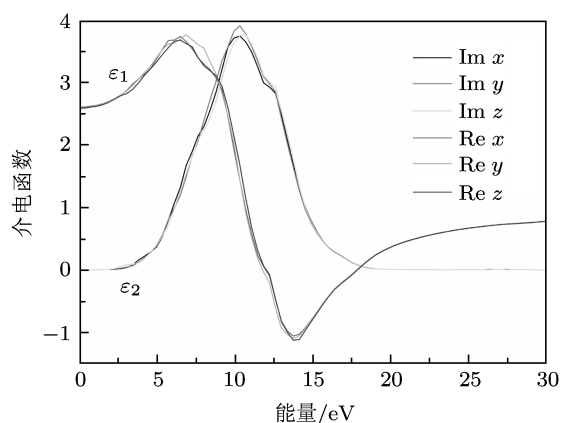


图3 γ -AlON 的复介电函数

4.3.2 γ -AlON 复折射率

分别取 ε_1 和 ε_2 三个主轴方向分量的平均值,由 (3),(4) 式计算得到 γ -AlON 的复折射率 (如图4所示),其中实部折射率 n 是描述材料光学性能的重要参数之一,虚部消光系数 k 是直接描述电磁波在材料内部衰减情况的参数.与图3对比可以发现, n 和 k 随光子能量的变化趋势分别和复介电函数的实部 ε_1 和虚部 ε_2 的变化趋势相似, γ -AlON 的折

射率 $n_0 = 1.61$, 在 6.87 eV 处达到峰值 $n_{\max} = 1.96$. 图4同时给出了 γ -AlON 红外到可见波段的折射率实验值^[21],与相应的计算值对比,发现计算值整体偏低接近 10%,这可能是本计算方法中未考虑电子激发态以及电子跃迁过程中的弛豫效应造成的. 消光系数 k 在 0—2.67 eV 能量范围内为零,在 12.97 eV 处达到峰值,此后随光子能量增大 k 值逐渐减小,在 20.23 eV 处减小到零,表明当光子能量为 20.23 eV 左右时达到 γ -AlON 的固有振荡频率,此时表征吸收的光学参量再次趋近于零, γ -AlON 将表现为紫外光学透明的特征.

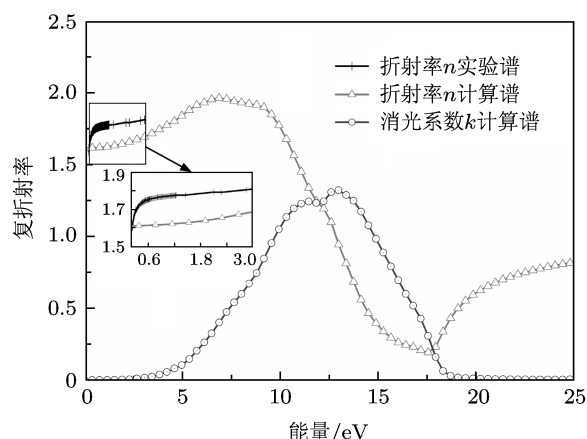


图4 γ -AlON 的复折射率

4.3.3 γ -AlON 吸收谱

根据前述复折射率参数,由 (6) 式进一步计算得 γ -AlON 的吸收系数随入射光能量的色散关系.吸收系数 α (单位通常取 cm^{-1}) 的物理意义是:光在介质中传播 $1/\alpha$ 距离时能量衰减到原来的 $1/e$. 吸收谱如图5所示,可以看出吸收系数呈先增大后减小的趋势,在 0—4.58 eV 的能量范围内接近零,且随能量增加变化较平缓,因此理论上完整的 γ -AlON 晶体在此频域内应该表现为无色透明,这一结果和 Hartnett 等^[3] 的结果十分接近; 5.73—18.32 eV 的能量范围吸收系数数量级达到 10^5 以上,为强吸收区,这正是从介电谱预测的结果;光子能量达到 20 eV 左右时,吸收系数又趋近于零,和消光系数的紫外吸收边值一致.另外,根据吸收谱的数据,不难发现吸收系数与能量的关系服从 $3/2$ 次方律^[22],故可根据吸收谱作 $[\alpha(\omega)]^2 \cdot \hbar\omega$ 图得到线性吸收边,再将吸收边的线性关系延伸,得到与横轴的交点 2.67 eV,即为吸收谱反映的光学带隙值,与态密度图显示的带隙宽度 $E_g = 2.52$ eV 较接近.

图5中还给出了 γ -AlON 透明陶瓷实验样

品(样品 1 较透明, 透过率接近 70%; 样品 2 半透明, 透过率为 30%左右) 在 1.38—6.2 eV 能量范围内的吸收率实验谱, 样品 1 的实验值与 2—6 eV 的相应计算结果较接近, 而样品 2 吸收系数整体高于样品 1 和计算的吸收率值, 可能是其中含有较多杂质及缺陷, 束缚在杂质和缺陷能级上的电子或空穴会引起额外的光吸收, 从而导致样品 2 吸收率整体偏高. 总体来看, 计算结果与实验值符合较好.

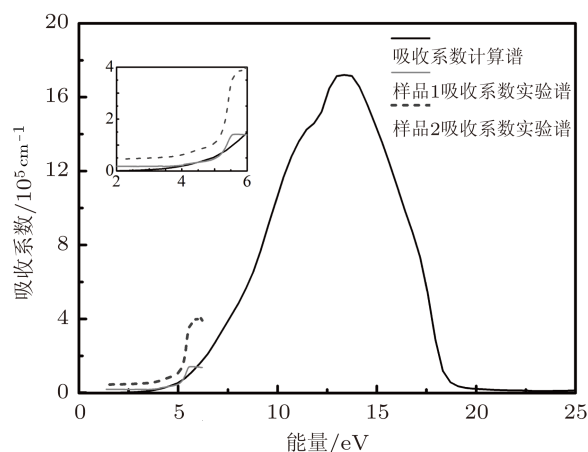


图 5 γ -AION 的吸收系数

4.3.4 γ -AION 反射谱

由 (5) 式可以算出 γ -AION 反射系数 R 的数值, 其反射谱如图 6 所示. 可以看出 γ -AION 反射率随入射能量的变化趋势和 $\varepsilon_2(\omega)$ 及消光系数 k 的变化趋势基本一致, 反射谱对应的带间跃迁主要发生在 14.51—17.56 eV 能量范围内, 在此频域内 γ -AION 对光的反射率达到 45%以上, 呈高反射特性, 折射率最低, 入射光较大部分被反射, 在 16.03 eV 处达到峰值, 而 0—5 eV 和 20 eV 以上的范围内反射率很低, 再综合吸收谱反映的结果, 由此可以得出 γ -AION 在这两个波段表现为光学透明的结论.

综合以上计算结果和分析, γ -AION 的光学性质可以按入射光子能量分为以下四个区域:

1) 红外及可见透明区 ($E < 4.58$ eV): 此区域内, 表征吸收的光学量 $\varepsilon_2(\omega)$ 、消光系数 k 、吸收系数 α 都随能量减小趋近于零, 折射率从 n_0 随能量增加而变大, 呈正常色散, γ -AION 在此能量区域内表现为无色透明.

2) 紫外共振吸收区 ($E \approx 10.31$ eV): 此区域附近, ε_2 出现极大, 入射光频率与体系的固有频率达到一致, 体系对光的吸收最强, 这与消光系数 k 在 12.97 eV 处达到峰值和吸收系数 α 在 13.36 eV 时达到峰值的计算结果也是十分接近的.

3) 紫外高反射区 (11.83 eV $< E < 17.94$ eV): 此区域内, 折射率随能量增加而减小, 呈反常色散, 反射率高达 45%以上, $\varepsilon_1 < 0$, 光不能在晶体中传播, γ -AION 表现为高反射特性.

4) 远紫外透明区 ($E > 20.23$ eV): 此区域内, 表征吸收的各光学参量均再次趋近于零, 折射率又随能量增加而变大, 表现为正常色散, γ -AION 再次表现出透明特性.

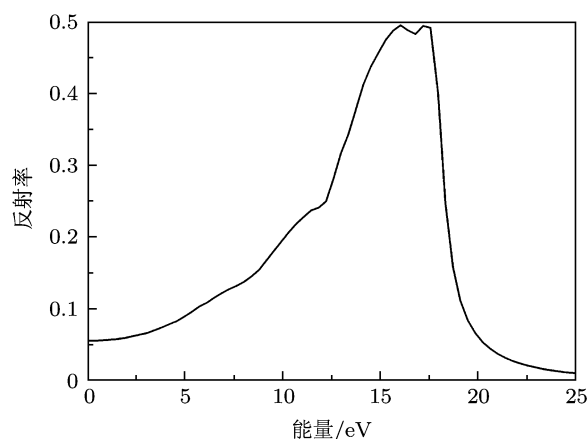


图 6 γ -AION 的反射系数

5 结论

本文采用局域密度近似结合投影缀加波方法, 通过第一性原理计算了平衡态下 γ -AION 的电子结构和光学性质参数, 理论计算结果表明: γ -AION 的价带主要由 Al 的 3s 态电子和 O 的 2p 态电子构成, 导带主要由 O 的 2p 态电子和 Al 的 3s 态电子构成, 带隙宽度 $E_g = 2.52$ eV, 其中 N 的 2p 态电子是影响 γ -AION 光学性质的主要因素; γ -AION 晶体沿各个方向的光学性质一致, 表现出各向同性的特点, 其零频介电常数 $\varepsilon_1(0) = 2.60$, 折射率 $n(0) = 1.61$; 在 0—4.58 eV 的低能区及 20.23 eV 以上的高能区表现为无色透明; 相关实验数据证明了理论计算的可靠性.

- [1] McCauley J M 1978 *J. Am. Ceram. Soc.* **61** 372
 [2] McCauley J M Corbin N D 1979 *J. Am. Ceram. Soc.* **62** 476
 [3] Hartnett T M, Maguire E A, Gentilman R L, Corbin N D, McCauley J W 1982 *Cera. Eng. and Sci. Proc.* **3** 67
 [4] McCauley J M, Parimal P, Mingwei C, Gilde G, Strassburger E, Paliwal B, Ramesh K T, Dandekar D P 2009 *J. Eur. Ceram. Soc.* **29** 223
 [5] Chang M F, Rudi M, Hubertus T H, Gijsbertus D W 2001 *J. Am. Ceram. Soc.* **84** 2633
 [6] Onyekwelu U O, Lowther J E 2010 *Chemical Physics Letters* **494** 323
 [7] Alay-e-Abbas S M, Sabir N, Saeed Y, Shaukat A 2010 *J. Alloys. Compd* **503** 10
 [8] Yue L C, Ma X G, Tang H, Wang Y, Li X, Jiang J J, 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1314 (in Chinese) [乐伶俐, 马新国, 唐豪, 王扬, 李翔, 江建军 2010 物理学报 **59** 1314]
 [9] Hohenberg P, Kohn W 1964 *Phys. Rev.* **136** B864
 [10] Kresse G, Hanfner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
 [11] Kresse G, Furthmuller 1996 *J. Comput Mater Sci.* **6** 15
 [12] Kresse G, Hanfner J 1994 *J. Phys: Condens Matter.* **6** 8245
 [13] Monkhorst H J, Pack D J 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
 [14] Huang K 1988 *Solid-State Physics* (Beijing: Higher Education Press) (in Chinese) [黄昆 1988 固体物理学 (北京: 高等教育出版社)]
 [15] Shen X C 2002 *The Spectrum and Optical Property of Semiconductor* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [沈学础 2002 半导体光谱和光学性质 (第二版) (北京: 科学出版社)]
 [16] French R H 1990 *J. Am. Ceram. Soc.* **73** 477
 [17] Li Z Q, Yin Y L, Liu X D, Li L Y, Liu H, Song Q G 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 083701
 [18] Dantas J M, Lalic M V 2010 *Optical Materials* **32** 1633
 [19] Zhang J K, Deng S H, Jin H, Liu Y L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5371 (in Chinese) [张金奎, 邓胜华, 金慧, 刘悦林 2007 物理学报 **56** 5371]
 [20] Cui D M, Xie Q, Chen Q, Zhao F J, Li X Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2027 (in Chinese) [崔冬萌, 谢泉, 陈茜, 赵凤娟, 李旭珍 2010 物理学报 **59** 2027]
 [21] Edward D P 1991 *Handbook of Optical Constants of Solids II* (California: Academic Press)
 [22] Fang R C 2001 *Solid State Spectroscopy* (Hefei: University of Science and Technology of China Press) (in Chinese) [方容川 2001 固体光谱学 (合肥: 中国科学技术大学出版社)]

Study of electronic structure and optical propertise of γ -AlON crystal*

Pan Lei¹⁾ Lu Tie-Cheng^{1)2)†} Su Rui¹⁾ Wang Yue-Zhong¹⁾ Qi Jian-Qi^{1)‡} Fu Jia¹⁾
 Zhang Yi¹⁾ He Duan-Wei³⁾

¹⁾ (College of Physical Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

²⁾ (Key Laboratory of Radiation Physics and Technology of Ministry of Education, Sichuan University ,Chengdu 610064, China)

³⁾ (Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

(Received 31 March 2011; revised manuscript received 25 May 2011)

Abstract

Based on the density function theory, the electronic structure, densities of states, and optical properties of γ -AlON are calculated by using the local density approximation and plane-wave pseudopotential method. The complex dielectric functions and the optical properties including refractive index, reflection spectra, absorption spectra of γ -AlON are analyzed in terms of calculated density of state. As shown by the theoretical calculation, the static dielectric function of γ -AlON is $\epsilon_1(0) = 2.60$, and the refractive index is $n_0 = 1.61$, its absorptions in a range from IR to NUV and a UV range up to 20.23eV all approach to zero, showing the optical transparent behaviors. The calculated results are consistent with relevant experimental values, providing theoretical basis and reference for the application of the optical material to windows and domes.

Keywords: γ -AlON, first-principles, electronic structure, optical properties

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 78.20.-e, 78.20.Ci

* Project sponsored by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.50872083), the Foud of Aeronautics Science(Grant No.20100119003), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities(Grant No.2009SCU11126).

† E-mail: lutiecheng@scu.edu.cn

‡ E-mail: qijianqi@scu.edu.cn