

## 黑索金电子结构和光学性质的第一性原理研究\*

程和平<sup>1)2)†</sup> 但加坤<sup>1)</sup> 黄智蒙<sup>1)</sup> 彭辉<sup>3)</sup> 陈光华<sup>1)</sup>

1) (中国工程物理研究院流体物理研究所, 绵阳 621900)

2) (黄山学院机电与信息工程学院应用物理研究所, 黄山 245041)

3) (北京理工大学, 爆炸科学技术国家重点实验室, 北京 100081)

(2013年3月20日收到; 2013年5月10日收到修改稿)

利用基于密度泛函理论的第一性原理方法对黑索金晶体的电子结构和光学性质进行了计算. 结果表明: 黑索金是能隙值为 3.43 eV 的绝缘体, 价带主要由 C, N 和 O 的 2s 与 2p 态构成, 而导带主要由 N-2p 和 O-2p 态构成; 静态介电函数  $\epsilon_1(0) = 1.38$ , 介电常数的虚部有 5 个峰值, 其中最大峰值在光子能量 4.59 eV 处, 并对造成这些峰值的可能的电子跃迁做了详细分析. 利用能带结构和态密度分析了黑索金的光反射系数、吸收系数及能量损失函数等光学性质, 发现黑索金是对光吸收、反射及能量损失不敏感的材料.

关键词: 黑索金, 第一性原理, 电子结构, 光学性质

PACS: 31.15.es, 71.20.-b, 78.20.Ci

DOI: 10.7498/aps.62.163102

## 1 引言

黑索金 (RDX) 作为一种重要硝铵类有机含能材料, 现在广泛用于炸药和推进剂, 出于安全方面的考虑, 其电子结构和光学性质研究在很早就受到重视. Isbell 和 Brewster<sup>[1]</sup> 曾对包括 RDX 在内的多种含能材料的吸收系数、反射系数等红外光学性质做了实验研究, 获得了红外范围内的光学参数谱. Whitley<sup>[2]</sup> 测量了 RDX 在 200—900 nm 范围内的光吸收系数, 发现了几个强吸收峰, 其实验结果与早期 Marinkas<sup>[3]</sup> 的光学实验测量结果类似. 固体材料的光学性质 (介电函数) 是由费米面附近的能带结构、载流子浓度和迁移率等决定的, 而材料的电子性质, 如能带带隙值, 往往是采用光学方法测得, 例如, 由 Whitley 和 Marinkas 的实验结果都能推算出 RDX 的带隙值为 3.4 eV.

采用量化计算研究有机晶体的电子结构和光学性质是一种重要方法. Lin 等<sup>[4]</sup> 用 CASTEP<sup>[5]</sup> 软件包计算了有机材料聚对苯二甲酸乙二酯的电子

结构和光学性质, 计算的部分结果和实验是相符的, 通过计算, 获得了对该材料的电子性质和光学性质的全面了解. 由于有机晶体主要是通过氢键等弱键作用结合形成的分子晶体, 此类晶体电子结构和光学性质规律与常见的半导体不同. 含能材料 RDX 晶胞中含有的原子数目较多, 因此计算量大. 迄今为止, RDX 的电子结构和光学性质的计算研究还没有系统的研究结果. 本文采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波超软赝势方法对 RDX 晶体进行几何优化, 计算其电子结构, 继而对光学性质进行了计算, 并对结果做了详细分析.

## 2 理论模型和计算方法

RDX 为分子晶体, 常压下的 RDX 为  $\alpha$  相, 即晶体中的 RDX 分子构型为 AAE 型<sup>[6]</sup>. Choi 和 Prche<sup>[7]</sup> 采用中子散射技术研究了 RDX 单晶结构, 发现 RDX 为正交晶体, 在一个晶胞中有 8 个 C—N 环状分子, 共有 168 个原子, 晶胞的长度分别为:  $a = 13.182 \text{ \AA}$ ,  $b = 11.574 \text{ \AA}$ ,  $c = 10.709 \text{ \AA}$ , 晶胞角度

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11272298) 和中国工程物理研究院流体物理所发展基金 (批准号: SFZ20110304, SFZ20110402) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: tunxi72@126.com

为  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ .

第一性原理计算由基于密度泛函理论的 CASTEP 软件包完成. 首先采用 BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)<sup>[8]</sup> 算法对晶胞进行几何结构优化, 然后计算其能带结构、电子态密度和光学性质. 电子-电子间的交换作用势选用广义梯度近似 (GGA) 交换关联中的 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 形式<sup>[9]</sup> 对 Kohn-Sham 方程和能量泛函进行自洽求解, 电子波函数用平面波基组展开, 截断能为 600 eV, 迭代过程的收敛精度为每个原子  $5 \times 10^{-6}$  eV, 原子间的相互作用收敛为每个原子 0.01 eV/Å, 第一布里渊区用 Monkhorst-Pack 方案<sup>[10]</sup> 按  $2 \times 2 \times 2$  划分  $K$  空间网格, 采用超软赝势<sup>[11]</sup> 计算电子结构. 参与计算的价电子分别是 H-1s<sup>1</sup>, C-2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup>, N-2s<sup>2</sup>2p<sup>3</sup> 和 O-2s<sup>2</sup>2p<sup>4</sup>. 能量计算都在倒易空间进行.

在 CASTEP 中计算晶体的光学性质时, 晶体介电常数虚部是利用跃迁概率定义计算公式:

$$\begin{aligned} \epsilon_2(q \rightarrow O_u, h\omega) \\ = \frac{2e^4\pi}{\Omega\epsilon_0} \sum_{k,v,c} |\langle \Psi_k^c | \mathbf{u} \cdot \mathbf{r} | \Psi_k^v \rangle|^2 \delta(E_k^c - E_k^v - E), \quad (1) \end{aligned}$$

上式中,  $\langle \Psi_k^c | \mathbf{u} \cdot \mathbf{r} | \Psi_k^v \rangle$  为位置矩阵,  $E_k^c, E_k^v$  分别为导带和价带的电子跃迁能量,  $E$  为光子能量. 然后根据 Kramers-Kronig 色散关系<sup>[12]</sup> 计算出介电常数实部  $\epsilon_1$ . 晶体的其他光学参数可以根据各自与介电函数的关系推导出. 分析时采用了非极化方法, 即垂直入射光不存在极化方向, 是各种极化光的平均值.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 几何优化

为了获得稳定的计算结构, RDX 晶体结构必须进行几何优化, 表 1 为 RDX 晶体几何优化后的晶体参数和实验参数的对比. 可以从表 1 中发现, RDX 晶体在经过几何优化之后, 晶格角度没有变化, 晶格长度比实验数据都有所增大, 晶格长度  $a, b$  和  $c$  的计算优化值比实验值分别提高了 4.1%, 3.8%和 11.1%, 在  $c$  方向上的变化比较明显, 可见在该方向上, 晶体具有较大的延展才能获得理论上的

稳定结构. 以下 RDX 晶体电子结构和光学结构的计算都在此优化结构的基础上进行.

表 1 RDX 晶体几何优化和实验测量的结构参数对比

	$a/\text{Å}$	$b/\text{Å}$	$c/\text{Å}$	$\alpha = \beta = \gamma/(\text{°})$	$V/\text{Å}^3$
实验数据 <sup>[7]</sup>	13.182	11.574	10.709	90	1633.856
计算结果	13.727	12.017	11.894	90	1962.003

#### 3.2 电子结构

因为影响 RDX 晶体物理性质的主要是费米能级附近的电子结构, 本文在  $-30$ — $10$  eV 光子能量范围内, 计算了沿布里渊区高对称点方向的能带结构和电子态密度 (总态密度和各原子的电子局域态密度).

图 1 为能带结构片段, 导带和价带共有 360 条能级, 其中价带有 336 条 (以图 1 中最低能级为第 1 条, 则价带能级标记分别为 1—336), 导带能级有 24 条 (标记为 337—360), 导带和价带数量多, 且在不同高对称  $k$  点方向上有简并. 这一计算结果和 Lin 等<sup>[4]</sup> 计算的有机物聚对苯二甲酸乙二酯的能带结构类似, 即价带和导带都没有明显离散. 第一布里渊区中高对称  $k$  点在价带顶  $E_v$  和导带底  $E_c$  的特征能量值见表 2. 从表 2 中可见, 最高价带的  $G$  点有最大特征值 0 eV, 同时在最低导带的  $G$  点有最小特征值 3.43 eV, RDX 晶体的能带带隙值计算为 3.43 eV, 因此, RDX 晶体是一种绝缘体.

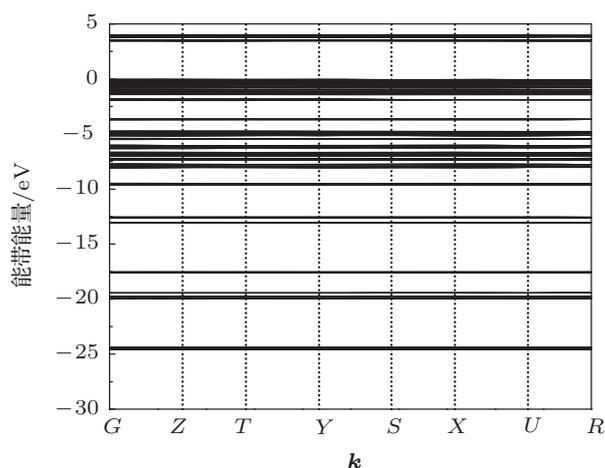


图 1 RDX 晶体的能带结构

Byrd 等<sup>[13]</sup> 曾用 GGA-PW91 泛函形式计算过多种含能材料的晶体电子性质, 他们认为平面波基组的截断能应大于 495 eV 才能获得收敛的带隙值,

表 2 第一布里渊区中的高对称  $k$  点在价带顶  $E_v$  和导带底  $E_c$  的特征能量值

	$G$	$Z$	$T$	$Y$	$S$	$X$	$U$	$R$
$E_v/\text{eV}$	0	-0.01	-0.04	-0.02	-0.07	-0.04	-0.05	-0.07
$E_c/\text{eV}$	3.43	3.45	3.45	3.44	3.46	3.45	3.45	3.45

他们计算出来的 RDX 晶体带隙值为 3.52 eV, 本文的计算结果比他们的计算结果略低 2.5%, 但和实验<sup>[2,3]</sup> 测得的带隙值 3.4 eV 非常符合.

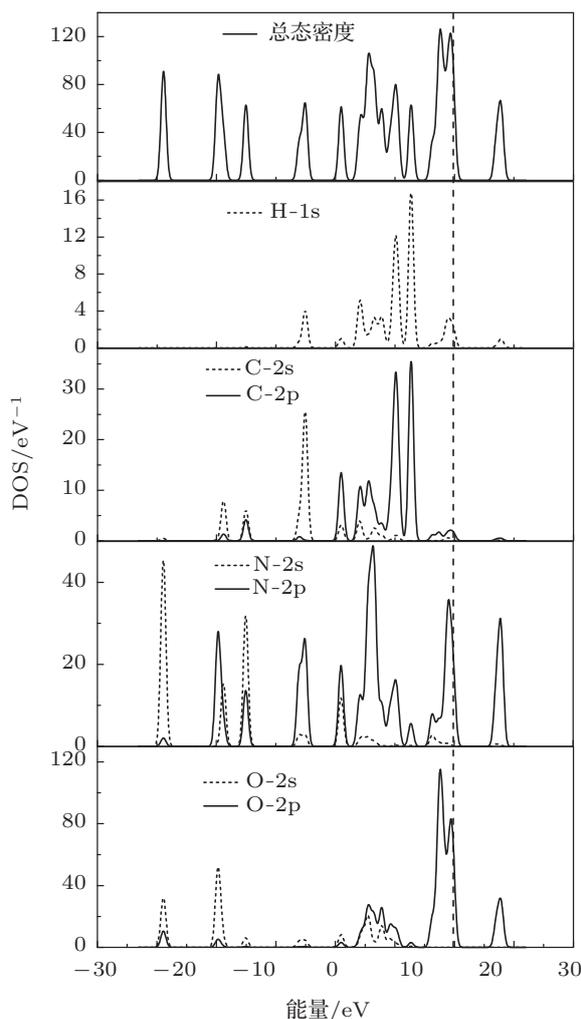


图 2 RDX 晶体的电子态密度

图 2 给出了 RDX 晶体的态密度. 从图 2 中可以看出, C, N, O 三种原子的 2p 电子对能带贡献较大. 在导带部分, 也就是在 3.43—4.02 eV 范围内, 主要是 N 和 O 的 2p 电子态构成; 在价带部分, -2.7 eV 到费米面的范围仍主要由 N 和 O 的 2p 电子态构成, O-2p 电子贡献大于 N-2p 电子; 在 -4.2—-2.7 eV 之间, H-1s 电子贡献仅次于 C-2p 电子; 在 -5.7—-4.2 eV 之间, N-2p, O-2p 参与的贡献

增大, 同时 H-1s 的贡献减小, 但 C-2p 贡献仍最大, 在 -10—-5.7 eV 范围, 各原子的态电子都参与了能带贡献, N-2p 起的作用大一些, 此时, s 电子和 p 电子重合度较高, 表明存在杂化现象; 在 -18.4—-10 eV 范围, 主要由 N 的 2s 和 2p 电子态构成, C 的 2s 电子态有少量贡献, 其他的电子态的贡献可以忽略; -30—-18.4 eV 范围内, 是 N 的 2s 和 2p 电子态和 O 的 2s 电子态起主要贡献, 也有杂化的可能.

### 3.3 光学性质

#### 3.3.1 介电函数

介电函数作为沟通带间跃迁微观物理过程与固体电子结构的桥梁, 反映了固体能带结构及其他各种光谱信息. RDX 作为绝缘材料, 其介电函数谱的形成是由能级间电子跃迁产生的, 各个介电谱峰可由 RDX 的能带结构和电子态密度来解释. 基于第一性原理的赝势平面波方法计算出来的 RDX 介电谱的实部  $\epsilon_1$  和虚部  $\epsilon_2$  如图 3 所示, 且其静态介电常数  $\epsilon_1(0) = 1.38$ .

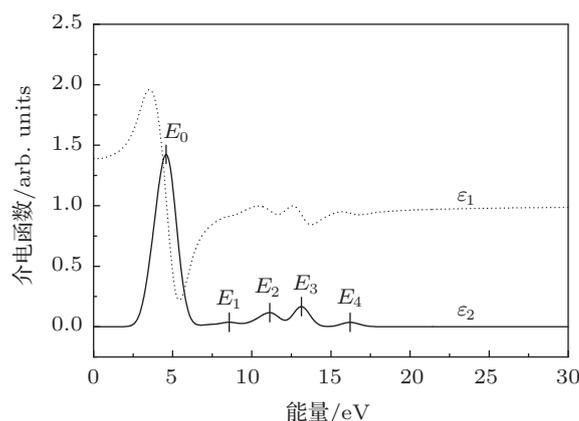


图 3 RDX 的介电函数谱

由于体系在较小波矢下对光场的线性响应由复介电常数的虚部  $\epsilon_2$  决定<sup>[14,15]</sup>, 所以对  $\epsilon_2$  分析是重点. 从图 3 上可以看出: 在光子能量为  $E_0 = 4.59$  eV 处, 介电函数谱虚部  $\epsilon_2$  达到第一峰值, 和一般半导体不同, RDX 介电函数虚部的第一峰值是由

多条靠近费米面的价带能级带间跃迁到不同的导带能级中形成的, 表 3 所列为由不同价带的对称  $k$  点带间跃迁到相应导带的对称  $k$  点的统计. 由于能级简并, 具有相同能量的导带能级和价带能级的高对称点较多, 造成可能的带间跃迁也较多, 第一个介电函数峰主要是由价带的 273—296 能级对应的各高对称点直接跃迁到导带 337—354 能级对应的各高对称点形成的, 由图 2 所示的态密度分析可知, 跃迁的主要源于 N-2p 态电子.

表 3 介电函数虚部的第一峰值对应的带间跃迁 ( $E_0 = 4.59$  eV)

能量/eV	价带		导带	
	能级编号 (对称点)	能级编号 (对称点)	能级编号 (对称点)	能量/eV
-0.69	293—294(T)	351—352(X)	353—354(Z)	3.90
	295—296(T, Y)			
-0.71	293—294(X)	351—352(Y)		3.88
-0.72	295(S)	351(G)		3.87
-0.73	293(G, Z, R)	349(X)	350(G, X)	3.86
	294(Z, R)			
	295—296(R)			
-0.75	291(G, X)	349—352(T, U)	349—352(R)	3.84
	292(X)			
-0.77	289—290(U)	345—348(R)	345—348(T, U)	3.82
	291—292(Y, U)			
-1.04		341—342(Z, T, R)	343—344(T, Y, X)	3.55
	280(G)	344(G)		
-1.12	273—276(U, R)	339—340(X)	339—340(X)	3.47
	275—276(Z)			
-1.13	277(G, Y)	337(S)	337(S)	3.46
	278(Y)			
-1.14	273—274(Z, T)	337(Z, T, X, U, R)	338(G, Z, T, X, U, R)	3.45
	275—276(T, Y)			
		339—340(Z, T, U, R)		
-1.16	275—276(X)	337(G)		3.43

在 7.5—17.5 eV 之间,  $\epsilon_2$  分别在光子能量  $E_1 = 8.57$  eV,  $E_2 = 11.13$  eV,  $E_3 = 13.14$  eV 和  $E_4 = 16.22$  eV 处有 4 个峰值, 这是价带更深的内部电子跃迁到导带形成的. 对于  $E_1 = 8.57$  eV 的第二个峰而言, 主要是由价带的 201—224 能级的各高对称点带间跃迁到导带 337—350 能级的各高对称点, 主要直接跃迁情况见表 4, 跃迁的主要源于 H-2s, C-2p, O-2p 和 N-2p 态电子. 对于  $E_2 = 11.13$  eV 的第三个峰, 主要是由价带的 127—152 能级的

各高对称点带间跃迁到导带 337—353 能级的各高对称点, 主要带间跃迁情况见表 5, 跃迁的主要源于 C-2p, O-2p 和 N-2p 态电子. 对于  $E_3 = 13.14$  eV 处的第四个峰, 主要是由价带的 97—104 能级的各高对称点带间跃迁到导带 341—343 能级的各高对称点, 主要跃迁情况见表 6, 跃迁的主要源于 C-2p, O-2s, N-2s 和 N-2p 态电子. 从上述分析可知, 产生介电函数的前四个峰值的主要原因是: 从费米面处浅层价带电子依次到深层的价带电子直接跃迁到导带形成.

对于  $E_4 = 16.22$  eV 处的第五个介电函数的微小峰值, 可能是由价带的 89—96 能级电子经由部分对称点跃迁到导带的 345 能级的 G 点上形成的.

表 4 介电函数虚部的第二峰值对应的带间跃迁 ( $E_1 = 8.57$  eV)

能量/eV	价带		导带	
	能级编号 (对称点)	能级编号 (对称点)	能级编号 (对称点)	能量/eV
-4.71	224(G)	349(X), 350(G, X)	349(G, Z, Y, R)	3.86
-4.74	221—224(T)	350(Z, Y, R)	351—352(R)	3.83
-4.75	223(G)	345—348(R)		3.82
-4.76	222(G)	345—346(T, U)	347(Z, T, Y, U)	3.81
	223—224(X)	348(G, Z, T, Y, U)		
-4.77	221—222(Z, Y, X, U, R)	345—346(Z)	347—348(X)	3.8
	223—224(U, R)			
-4.80	220—221(G)	346(G)		4.75
-4.82	219—220(X)	345—346(Y, X)	345(G)	3.75
-4.83	219(G, Z, Y, U, R)	345(G)	341—342(U)	3.74
	220(Z, Y, U, R)			
-5.01	209(Z)	343(Z, U, R)	344(Z, U, R)	3.56
	210(G, Z)			
-5.02	209—210(Y)	343(T, Y, X)	341—342(Z, T, R)	3.55
			344(G, T, Y, X)	
-5.06	205—206(U)	339—341(G, Y)	342(G)	3.51
	207(Z, X, U)			
	208(Z, X, U)			
-5.12	201—202(R)	337(Z, T, X, U, R)	338(G, Z, T, X, U, R)	3.45
	203(Y, X, R)	339(Z, T, U, R)		
	204(G, Y, X, R)	340(Z, T, U, R)		

表 5 介电函数虚部的第三峰值对应的带间跃迁 ( $E_2 = 11.13$  eV)

能量/eV	价带		导带	
	能级编号 (对称点)	能级编号 (对称点)	能级编号 (对称点)	能量/eV
-7.22	148(G)		353(G,T,Y,X)	3.91
	149(G,Z,Y,X,U)			
	150(G,Z,Y,X,U)			
	151—152(Z,U)			
-7.23	145(Z,T,Y,X,U,R)		351—352(X)	3.90
	146—147(G,Z,T,Y,X,U,R)		353(Z)	
	148(Z,T,Y,X,U,R)			
-7.24	141—144(Z,U)		352(G)	3.89
	141(Y)			
-7.25	142(G,Y)		351—352(Y)	3.88
	143—144(G,Y,X)			
	139(Y,X), 140(G,Y,X)			
-7.26	141(G,T,X,R)		351(G)	3.87
	142(T,X,R)			
	143—144(T,R)			
	137(Z,T,Y,U,R)			
-7.27	138(G,Z,T,Y,U,R)		350(X)	3.86
	139(G,Z,T,U,R)			
	140(Z,T,U,R)			
	137(Z,T,Y,U,R)			
-7.28	137—138(Y)		351—352(Z)	3.85
	133(G,Z,X,U)			
-7.35	134(Z,X,U,R)		347(G)	3.78
	135—136(U,R)			
-7.36	129—130(Z,T,X,U,R)		346(G)	3.77
	131(G,Z,T,Y,X,U,R)			
	132(Z,T,Y,X,U,R)			
-7.38	129(G)		345—346(Y,X)	3.75
			337(Z,T,X,U,R)	
-7.68	128(G)		338(G,Z,T,X,U,R)	3.45
			339—340(Z,T,U,R)	
-7.69	127—128(X)		337—338(Y)	3.44

表 6 介电函数虚部的第四峰值对应的带间跃迁 ( $E_3 = 13.14$  eV)

能量/eV	价带		导带	
	能级编号 (对称点)	能级编号 (对称点)	能级编号 (对称点)	能量/eV
-9.58	103—104(X)		341—342(U)	3.56
			343—344(Z,U,R)	
-9.59	101—102(Z,T,U)		341—342(Z,T,R)	3.55
	103—104(Z,T,Y,U)		343(T,Y,X)	
			344(G,T,Y,X)	
-9.60	97—98(T,R)		341—342(X)	3.54
	99(Z,T,Y,R)			
	100(G,Z,T,Y,R)			
	101—102(G,Y,X,R)			
	103—104(R)			
-9.62	97(Z), 98(G,Z)		342(G)	3.52

### 3.3.2 吸收谱和反射谱

吸收系数表示光在晶体中传播, 在单位距离上的强度衰减. 图 4(a) 为计算获得的 RDX 吸收谱和参考文献 [1, 2] 中实验测定 RDX 的吸收谱. 在我们的计算结果中, 光子能量 2 eV (波长为 456 nm) 到光子能量 18.3 eV (波长为 68 nm) 之间存在五个吸收峰值, 在光子能量 5 eV 有最大吸收峰值  $5.1 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$  以及在光子能量 8.62, 11.19, 13.18, 16.23 eV 有  $0.3 \times 10^4$ ,  $1.1 \times 10^4$ ,  $1.8 \times 10^4$ ,  $0.5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$  四个吸收峰值. 在波长小于 68 nm 和大于 456 nm 的区域内, 吸收谱的值为零, 说明 RDX 对光的吸收的不强烈, 为透明固体. 参考文献 [1] 测定的是红外光谱, 其光子能量范围为 0.07—0.48 eV, 参考文献 [2] 测定的 RDX 吸收谱范围为 1.5—4.3 eV, 从图 4(a) 中可以看出, 计算结果和参考文献 [1] 的结果有一定差别, 但是和参考文献 [2] 的结果较为接近.

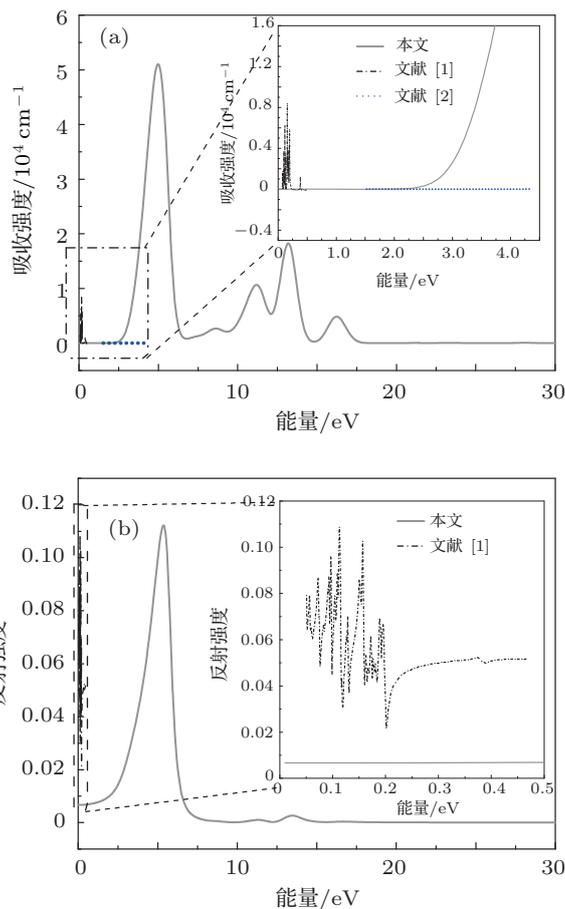


图 4 (a) RDX 的吸收谱; (b) RDX 的反射谱

RDX 反射谱和参考文献 [1] 中的反射谱如图 4(b) 所示. 计算结果表明, 只有在光子能量 5.36 eV 附近有一个峰值为 0.11 的最强反射峰, 在其他地方

的反射率很小, 趋于零, 可见 RDX 对光的反射较弱. 参考文献 [1] 中反射谱的范围为 0.07—0.48 eV, 该实验测定结果高于计算结果. 在 0.07—0.2 eV 之间, 实验结果表明反射谱有振荡, 在 0.2 eV 之后反射谱趋于平稳, 和计算结果类似.

### 3.3.3 能量损失谱

能量损失函数表征的是电子通过均匀电介质时能量的损失情况, 与介电函数的关系为

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}.$$

图 5 为 RDX 的能量损失函数谱, 可见, 在能量 2.1—17.9 eV 之间, 存在多个损失函数峰值, 在能量 5.63 eV 处存在一个 1.8 大小的最大峰值, 然后分别在能量 8.54, 11.21, 13.26, 16.23 eV 处存在 0.04, 0.12, 0.19, 0.04 四个小峰, 在能量小于 2.1 eV 和大于 17.9 eV 区域内, RDX 的能量损失为零.

## 4 结论

利用基于密度泛函理论的第一性原理方法对 RDX 晶体的电子结构和光学性质进行了计算. 计算结果表明, RDX 是绝缘体, 能隙值为 3.43 eV 和实验结果非常符合; 价带主要由 C, N 和 O 的 2s 与

2p 态构成, 而导带主要由 N-2p 和 O-2p 态构成; 介电常数的虚部有 5 个峰值, 其中最大峰值在光子能量 4.59 eV 处, 静态介电函数  $\varepsilon_1(0) = 1.38$ ; RDX 对光的吸收不强烈; 在能量 5.63 eV 处, 能量损失函数存在一个 1.8 大小的最大峰值, 而在其他位置, 能量损失不大.

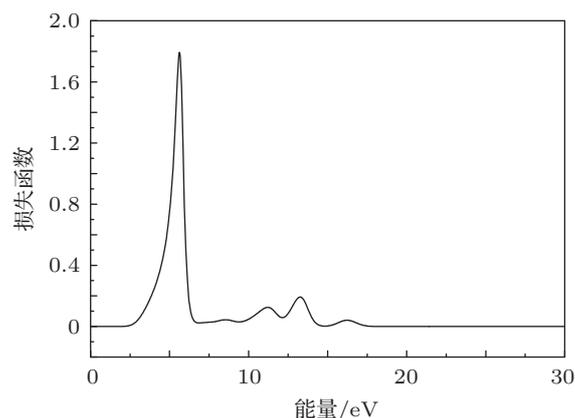


图 5 RDX 的能量损失函数

感谢流体物理研究所姬广富研究员的有益讨论以及覃睿博士在计算上提供的帮助.

- [1] Isbell R A, Brewster M Q 1998 *Propell. Explos. Pyrot.* **23** 218
- [2] Whitley V H 2005 *Proceedings of the Conference of the American Physical Society Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter* Baltimore, Maryland, USA, July 31–August 5, 2005 p1357
- [3] Marinkas P L 1977 *J. Lumin.* **15** 57
- [4] Lin J Q, Ni H F, Wang C, Lei Q Q 2010 *Acta Opt. Sin.* **30** 3239 (in Chinese) [林家齐, 倪海芳, 王晨, 雷清泉 2010 光学学报 **30** 3239]
- [5] Clark S J, Segall M D, Pickard C J, Hasnip P J, Probert M J, Refson K, Payne M C 2005 *Z. Kristallogr.* **220** 567
- [6] Rice B M, Chabalowski C F 1997 *J. Phys. Chem. A* **101** 8720
- [7] Choi C S, Prince E 1972 *Acta Cryst.* **B28** 2857
- [8] Pfrommer B G, Cote M, Louie S G, Cohen M L 1997 *J. Comput. Phys.* **131** 233
- [9] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [10] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [11] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [12] Huang K 2002 *Solid Physics* (Beijing: Higher Education Press) p439 (in Chinese) [黄昆 2002 固体物理学 (北京: 高等教育出版社) 第 439 页]
- [13] Byrd E C, Scuseria G E, Chabalowski C F 2004 *J. Phys. Chem. B* **108** 13100
- [14] Feng J, Xiao B, Chen J C 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5990 (in Chinese) [冯晶, 肖冰, 陈敬超 2007 物理学报 **56** 5990]
- [15] Li X Z, Xie Q, Chen Q, Zhao F J, Cui D M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2016 (in Chinese) [李旭珍, 谢泉, 陈茜, 赵凤娟, 崔冬萌 2010 物理学报 **59** 2016]

# First-principles study on the electronic structure and optical properties of RDX\*

Cheng He-Ping<sup>1)2)†</sup> Dan Jia-Kun<sup>1)</sup> Huang Zhi-Meng<sup>1)</sup>  
Peng Hui<sup>3)</sup> Chen Guang-Hua<sup>1)</sup>

1) (Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Miangyang 621900, China)

2) (Institute of Applied Physics, School of Mechanical Electronic and Information Engineering, Huangshan University, Huangshan 245041, China)

3) (State Key Laboratory of Explosion and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

(Received 20 March 2013; revised manuscript received 10 May 2013)

## Abstract

Electronic structure and optical properties of RDX are calculated by the first-principle density function theory pseudopotential method. The calculated results show that RDX is an insulator with a band gap of 3.43 eV, that the valence band of RDX is mainly composed of C-2s, C-2p, N-2s, N-2p and O-2s, O-2p, and that the conduction bands are mainly composed of N-2p and O-2p. The static dielectric function  $\epsilon_1(0)$  is 1.38, the imaginary part of dielectric function has five peaks and the largest peak is at the position corresponding to 4.6 eV of photon energy. The electronic direct transitions for these peaks are analyzed in detail. The absorption, reflectivity and loss function of RDX are analyzed in terms of calculated band structure and density of states. The results indicate that the RDX is not sensitive to the optical absorption nor to reflectivity nor to energy loss.

**Keywords:** RDX, first-principles, electronic structure, optical properties

**PACS:** 31.15.es, 71.20.-b, 78.20.Ci

**DOI:** 10.7498/aps.62.163102

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11272298) and the Development Foundation of Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics (Grant Nos. SFZ20110304, SFZ20110402).

† Corresponding author. E-mail: tunxi72@126.com