

## 短波红外通道 CO<sub>2</sub> 观测的温度敏感性分析

邹铭敏<sup>1,2</sup>, 陈良富<sup>1</sup>, 陶金花<sup>1</sup>, 苏林<sup>1</sup>, 韩冬<sup>1</sup>, 贺宝华<sup>1,2</sup>, 张莹<sup>1,2</sup>, 余超<sup>1,2</sup>

(1. 中国科学院遥感应用研究所, 遥感科学国家重点实验室, 北京 100101;

2. 中国科学院研究生院, 北京 100049)

**摘要:**近红外通道观测大气 CO<sub>2</sub> 含量是利用其对太阳辐射的吸收作用, 温度是影响吸收气体吸收的一个重要因子, 文中讨论了 CO<sub>2</sub> 观测的温度敏感性. 首先阐述了温度对气体吸收谱线的强度、增宽的影响; 然后根据 CO<sub>2</sub> 反演过程中使用的大气温度产品的精度水平, 利用逐线积分辐射传输模型模拟计算了 1 K 的随机温度误差对垂直大气观测的影响, 以及由此导致的 CO<sub>2</sub> 反演误差, 并与模拟的 1 ppm 和 2 ppm 的 CO<sub>2</sub> 浓度变化所造成的观测与反演变化量进行了比较. 通过对比分析六种大气模式下的模拟计算结果, 得出 1 K 大气随机温度误差是影响高精度大气 CO<sub>2</sub> 观测反演的重要因子.

**关键词:**谱线强度; 谱线加宽; 线型函数; 辐射传输模型

**中图分类号:**P407.4 **文献标识码:**A

## Temperature sensitivity analysis of carbon dioxide measurement in SWIR band

ZOU Ming-Min<sup>1,2</sup>, CHEN Liang-Fu<sup>1</sup>, TAO Jin-Hua<sup>1</sup>, SU Lin<sup>1</sup>, HAN Dong<sup>1</sup>,  
HE Bao-Hua<sup>1,2</sup>, ZHANG Ying<sup>1,2</sup>, YU Chao<sup>1,2</sup>

(1. The State Key Laboratory of Remote Sensing Science, Institute of Remote Sensing Applications,  
Chinese Academy of Science, Beijing 100101, China;

2. Graduate University of Chinese Academy of Science, Beijing 100049, China)

**Abstract:** Carbon dioxide has an absorption band of solar spectra in SWIR, and temperature is a key factor to the absorption effect. Researches on the CO<sub>2</sub> observation sensitivity of temperature are done in this paper. First, the dependences of spectral line parameters on temperature are discussed. Then, according to the accuracy level of atmosphere temperature profile product, we simulate the change of measurement in nadir mode by importing 1 K temperature uncertainty, using line-by-line radiative transfer mode under 6 different atmosphere modes, and calculate the corresponding change of retrieval result. In contrast, simulations of measurement change resulted from 1 ppm and 2 ppm CO<sub>2</sub> column density differences are also done. After comparison, we come to a conclusion: 1 K uncertainty of atmosphere temperature profile is an important factor which has significant influence to high precise atmospheric CO<sub>2</sub> observation.

**Key words:** line intensity; line broaden; line-shape function; radiative transfer mode

**PACS:** 93.85.Pq

### 引言

2007 年 IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change) 发布的第四次评估报告指出<sup>[1]</sup>, 自 20 世纪中期以来全球平均温度上升, 很可能是由于 CO<sub>2</sub> 过量排放引起的. 当前对碳空间分布, 以及碳循环的反馈效应了解有限, 导致了气候变化预测的不

确定性. 要解决这些问题, 监测大气中 CO<sub>2</sub> 的浓度与空间分布以及随时间的变化情况至关重要. CO<sub>2</sub> 传统地基观测可提供精确的大气 CO<sub>2</sub> 浓度信息, 但数据量太少. 基于卫星平台的观测方式则可以提供区域尺度的连续观测数据, 然而热红外通道观测对近地面大气 CO<sub>2</sub> 含量不敏感<sup>[2,3]</sup>, 因此短波近红外 CO<sub>2</sub> 遥感成为研究的热点<sup>[4]</sup>. 美国的碳观测卫星

收稿日期: 2011-05-04, 修回日期: 2012-05-27

基金项目: 国家自然科学基金重点项目(41130528)

Foundation item: Supported by the National Nature Science Foundation of China(41130528)

作者简介 (Biography): 邹铭敏(1986-), 男, 安徽六安人, 博士研究生, 研究方向是大气遥感. E-mail: zoumm@139.com.

Received date: 2011-05-04, revised date: 2012-05-27

OCO 以及日本的温室气体观测卫星 GOSAT 都将 1.6 μm 波段选择为 CO<sub>2</sub> 探测通道<sup>[2,5]</sup>.

模式模拟结果显示要识别并描述地表 CO<sub>2</sub> 源汇的季节变化, X<sub>CO<sub>2</sub></sub> 的观测精度须达到 0.3% ~ 0.5%<sup>[6]</sup> (1 ~ 2 ppm). 那么目前短波红外通道的卫星观测精度是否能满足这一要求呢? 大气温度、压力影响 CO<sub>2</sub> 的吸收强弱, 尤其是大气温度. 本文不考虑气溶胶、云等散射因子的影响, 假定压力已知, 着重讨论大气温度差异对 CO<sub>2</sub> 吸收作用的影响, 由于大气温度廓线的卫星反演误差可以达到 1 K<sup>[7]</sup>, 那么这个温度误差能给 CO<sub>2</sub> 的反演带来多大的影响? 文章从 CO<sub>2</sub> 吸收谱线的强度、半宽以及线型函数的温度依赖性出发, 利用逐线积分辐射传输模型模拟计算大气温度变化引起的观测值差异, 并将观测值误差转换为 CO<sub>2</sub> 反演误差, 进而分析其对星载 CO<sub>2</sub> 观测精度的影响.

### 1 CO<sub>2</sub> 谱线参数的温度依赖性

#### 1.1 谱线线强与温度

谱线强度与温度的关系如式(1)所示<sup>[8]</sup>

$$S(T) = \frac{S(T_s)Q_v(T_s)Q_r(T_s)}{Q_v(T)Q_r(T)} \cdot \exp\left(\frac{1.439E''(T - T_s)}{T \cdot T_s}\right), \quad (1)$$

式中, E'' 表示跃迁的低能态, Q<sub>v</sub> 和 Q<sub>r</sub> 分别表示振动和转动配分函数, S(T<sub>s</sub>) 表示参考温度 T<sub>s</sub> 下的线强.

#### 1.2 半宽与温度

引起谱线增宽的原因包括以下 3 种 [Goody R. M *et al.*, 1989]: 自然增宽、压力增宽和 Doppler 增宽. 可分别用 Lorentz 半宽 α<sub>L</sub> 和 Doppler 半宽 α<sub>D</sub> 表示:

$$\alpha_L = \alpha_0(T_s, P_s) \cdot \left(\frac{P}{P_s}\right) \cdot \left(\frac{T}{T_s}\right)^{-n}, \quad (2)$$

$$\alpha_D = \frac{v}{c} \left(\frac{2k \ln 2}{m}\right)^{0.5} = 4.298 \times 10^{-7} v \left(\frac{T}{M}\right)^{0.5}, \quad (3)$$

式(2)中, α<sub>0</sub>(T<sub>s</sub>, P<sub>s</sub>) 表示标准温度下的半宽; 对于 CO<sub>2</sub>, n = 0.75. 式(3)中, c 表示光速; k 为 Boltzmann 常数; M 表示吸收气体分子量.

#### 1.3 线型函数与温度

根据成因不同, 谱线增宽可分别用 Lorentz、Doppler、Voigt 三种线型函数表示, 分别对应公式(4), (5), (6):

$$f_L(v - v_0) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\alpha_L}{(v - v_0)^2 + \alpha_L^2}, \quad (4)$$

$$f_D(v - v) = \frac{1}{\alpha_D \sqrt{\pi}} \cdot \exp\left[-\left(\frac{v - v_0}{\alpha_D}\right)^2\right], \quad (5)$$

$$f_V(v - v_0) = \frac{y}{\alpha_D \pi^{1.5}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-t^2)}{y^2 + (x - t)^2} dt, \quad (6)$$

上式中 v<sub>0</sub> 表示吸收谱线的中心波长, x =  $\frac{v - v_0}{\alpha_D}$ ,

$$y = \frac{\alpha_L}{\alpha_D}.$$

大气底层分子浓度大, 压力增宽是谱线增宽的主要原因, 线型选择 Lorentz 函数; 大气高层空气稀薄, Doppler 增宽是谱线增宽主要原因, 线型选用 Doppler 函数; 在中层大气中, 要兼顾压力增宽和 Doppler 增宽效应, 线型选用 Voigt 线型函数 (S. R. Drayson, 1976), 图 1 给出了三种线型因子随温度的

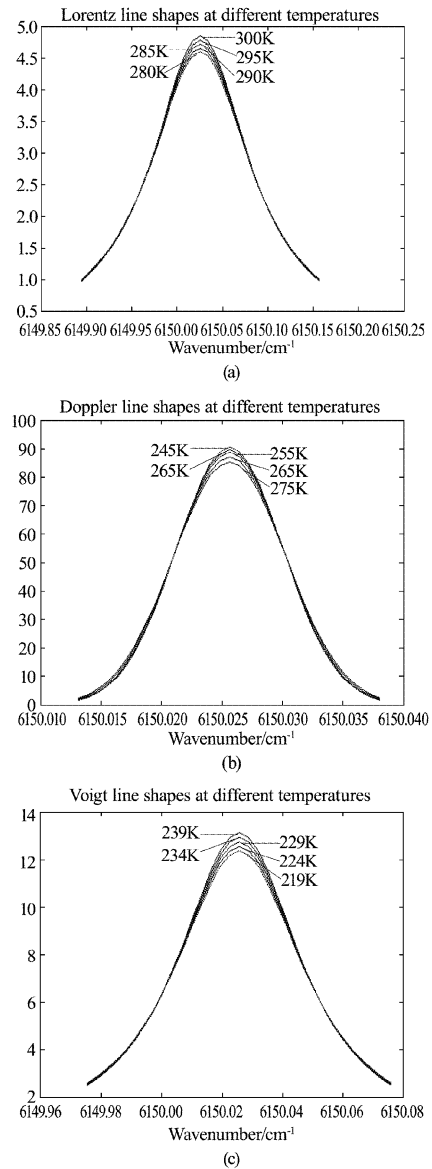


图 1 不同温度下的三种线型函数 (a) Lorentz 线型, (b) Doppler 线型, (c) Voigt 线型  
Fig. 1 Three kinds of line-shape function under different temperatures (a) Lorentz, (b) Doppler, (c) Voigt

变化情况. 结果表明压强不变时, Lorentz 线型和 Voigt 线型在中心波长处的吸收随着温度的上升而上升, 而 Doppler 线型则正好相反.

## 2 温度对观测的影响

利用高光谱技术观测反演 CO<sub>2</sub> 过程中, 大气温度廓线精度在 1 K 以内<sup>[7]</sup>, 这 1 K 的误差会多大程度上影响到 CO<sub>2</sub> 的反演精度? 下面正向模拟计算 1 K 的温度反演误差对水平和垂直两种方式大气观测的影响. 正向模拟过程中, 除了温度, 其他输入均采用模拟时选用的标准大气模式提供的大气状态参数, 且不加入气溶胶、云等散射因子.

### 2.1 温度误差对 CO<sub>2</sub> 水平观测的影响

模拟以 US1976 美国标准大气为背景, 默认 CO<sub>2</sub> 浓度为 385 ppm, 模拟大气温度减少 1 K 时大气透过率的变化量; 模拟使用逐线积分辐射传输模型 LBLRTM, 光谱分辨率设为 0.07 cm<sup>-1</sup><sup>[4]</sup>, 波段范围为 6150 ~ 6300 cm<sup>-1</sup>, 分别计算底层、中层、高层水平大气透过率随温度改变 1 K 而发生的变化. 作为比较, 令大气温度不变, CO<sub>2</sub> 的浓度减小 0.3% (~1.15 ppm), 再模拟水平大气透过率随 CO<sub>2</sub> 浓度的变化. 结果如图 2 所示.

由图 2 可知, 水平大气因温度变化 1 K 而造成的透过率变化幅度与因 CO<sub>2</sub> 浓度变化 0.3% 而引起的透过率变化百分比幅值是相当的. 所以, 在高精度反演水平大气中吸收气体浓度时, 1 K 的温度误差会给反演结果带来不可忽略的误差.

### 2.2 温度误差对垂直大气观测的影响

垂直观测相当于是由多个不同环大气状态的水平观测组成. 模拟仍以 US1976 美国标准大气为例, 在垂直观测几何条件下, 将 1 K 的温度误差随机的增加或减少到各大气分层上, 这样得到整层大气透过率和大气顶观测辐亮度的变化百分比, 如图 3 所示.

为了探究大气 ±1 K 的随机温度误差对星载 CO<sub>2</sub> 垂直观测的影响, 针对 6 种不同标准大气模式分别产生 100 个模拟观测样本, 计算其导致的辐射值变化百分比, 并同样与大气 CO<sub>2</sub> 浓度变化造成的观测值变化进行对比. 每种模式大气中 CO<sub>2</sub> 浓度默认为 385 ppm, 然后把 1 K 的气温误差随机的分配到模式大气默认的温度廓线中, 模拟垂直观测辐射值的变化  $\delta R1$ . 按此种方式, 每种大气模式下 100 个模拟样本可以获得 100 个观测变化值  $\delta R1_i$  ( $i=1, 2, \dots, 100$ ). 作为对比, 在不改变大气模式其它默认参数的情况下, 仅减少 CO<sub>2</sub> 浓度 0.3% (~1.15 ppm)、

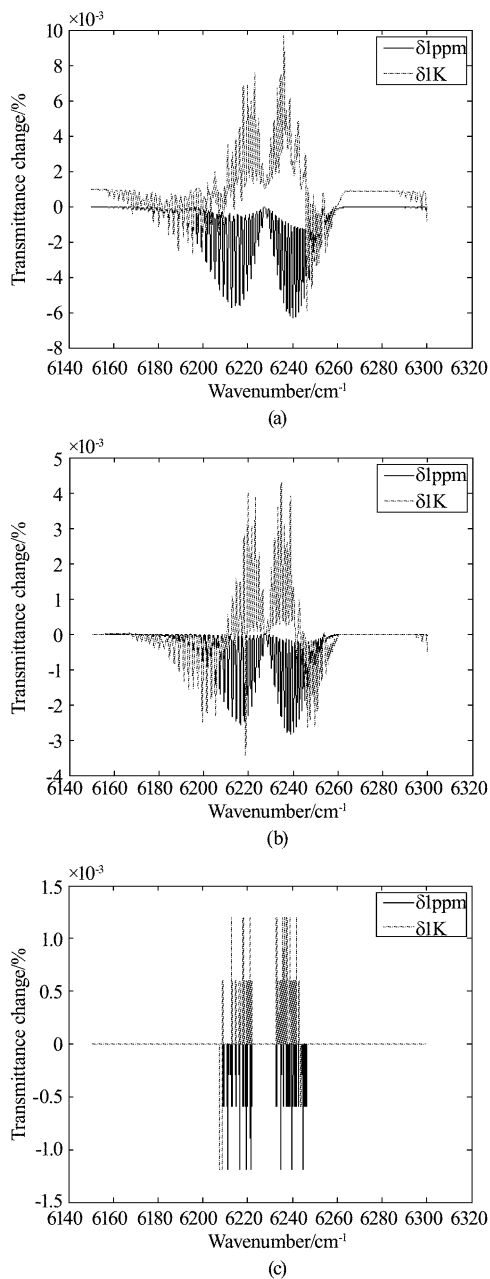


图 2 水平大气观测透过率变化, 虚线温度变化 1 K 而引起的大气透过率的变化百分比, 实线表示 CO<sub>2</sub> 浓度变化 1 ppm 引起的透过率的变化百分比 (a) 底层大气, (b) 中层大气, (c) 上层大气

Fig. 2 Transmittance change of horizontal observations at different altitude, dashed line represents transmittance change ratio for 1 K temperature variation and real line represents transmittance change ratio for 1 ppm density variation (a) lower atmosphere, (b) middle atmosphere, (c) upper atmosphere

0.5%, 计算得到  $\delta R2$ , 并与  $\delta R1_i$  进行比较. 结果对比如图 4 所示, 波段区间是 6150 ~ 6300 cm<sup>-1</sup>, 光谱分辨率为 0.07 cm<sup>-1</sup>. 结果表明: 不同气候模式在温度误差和 CO<sub>2</sub> 浓度变化引起的辐射值的变化所出现的波段区间是相似的. 因温度廓线反演误差 1 K 引

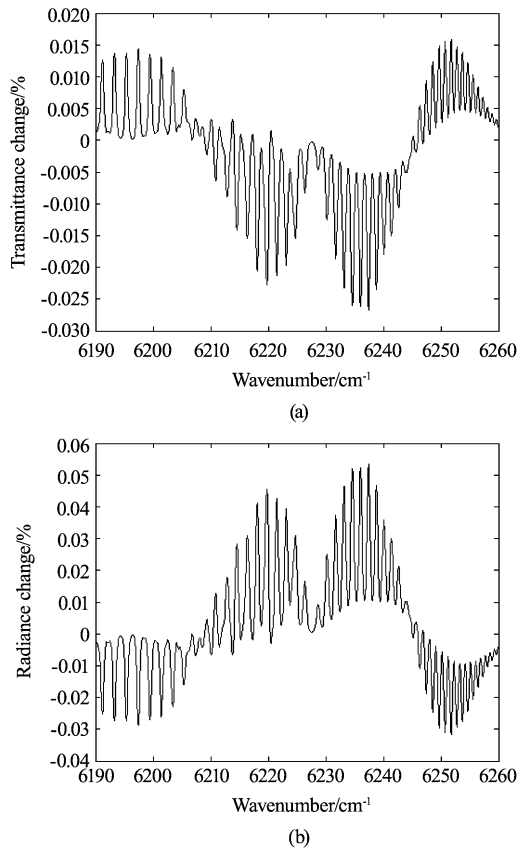


图3 透过率和辐射亮度化百分比(a)透过率,(b)辐射亮度

Fig. 3 Change ratios of transmittance and radiance (a) Transmittance, (b) Radiance

起的辐射值变化较大的出现在  $6190 \sim 6205 \text{ cm}^{-1}$ 、 $6215 \sim 6225 \text{ cm}^{-1}$ 、 $6230 \sim 6245 \text{ cm}^{-1}$  和  $6245 \sim 6255 \text{ cm}^{-1}$  4 个波段范围内,而由于  $\text{CO}_2$  浓度变化引起的辐射值变化主要集中在两个区间,即  $6190 \sim 6227 \text{ cm}^{-1}$  和  $6227 \sim 6260 \text{ cm}^{-1}$ . 其中因温度差引起的误差变化最大值出现在  $6230 \sim 6245 \text{ cm}^{-1}$ , 该区间 6 个大气模式的最大辐射变化幅值可达 0.1%、0.09%、0.095%、0.098%、0.1% 和 0.088%;  $\text{CO}_2$  浓度变化 0.3%、0.5% 而引起的辐射值最大变化值在该区间可达 0.08%、0.15%, 这表明由于温度 1 K 误差引起的辐射值误差和  $\text{CO}_2$  浓度变化 0.3% 在同一个数量级.

对上面得到的辐射值变化结果统计其变化均值,同时计算浓度变化 0.3% 引起的辐射变化均值. 结果如图 5 所示,图中对 100 个样本的辐射变化均值按其大小进行了排列,曲线图的横坐标表示重新排列后的样本序号,图中水平线条表示浓度变化 0.3% 时引起的辐射变化均值.

### 2.3 温度误差对 $\text{CO}_2$ 浓度反演精度的影响

上面一节模拟了 1 K 随机温度误差引起的观测

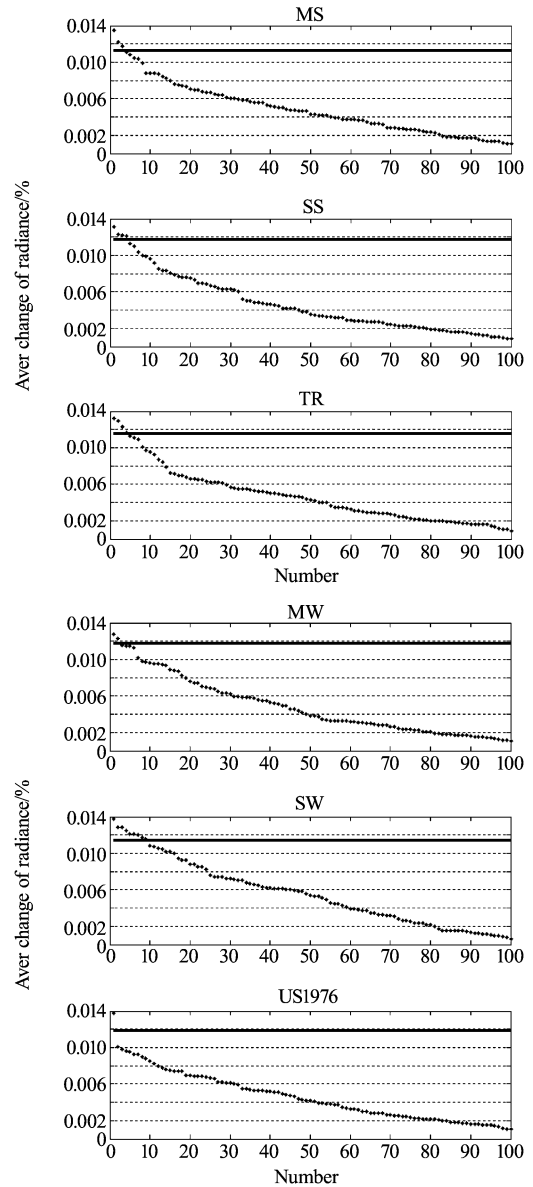


图5 辐射值变化均值

Fig. 5 Average value of radiance variations

变化量. 那么由于温度误差带来的辐射的观测值变化,会给  $\text{CO}_2$  浓度反演带来多大的误差? 下面引用 Yokota, T *et al* (2003) 给出的计算模型,计算辐射观测值变化引起的二氧化碳反演值变化情况. 模型形式如下,其中 A 表示 Jacobian 矩阵,  $\delta Y$  表示观测变化量,  $\delta X$  表示  $\text{CO}_2$  浓度变化量.

$$\delta X = (A^T A)^{-1} A^T \delta Y \quad (7)$$

为了说明该模型的精度,利用  $\text{CO}_2$  浓度差模拟的辐射变化值进行评估,即对于垂直观测模拟中因给定  $\text{CO}_2$  浓度改变 0.5%、0.3% 而引起的观测值变化,计算其导致的  $\text{CO}_2$  反演浓度的变化百分比,结

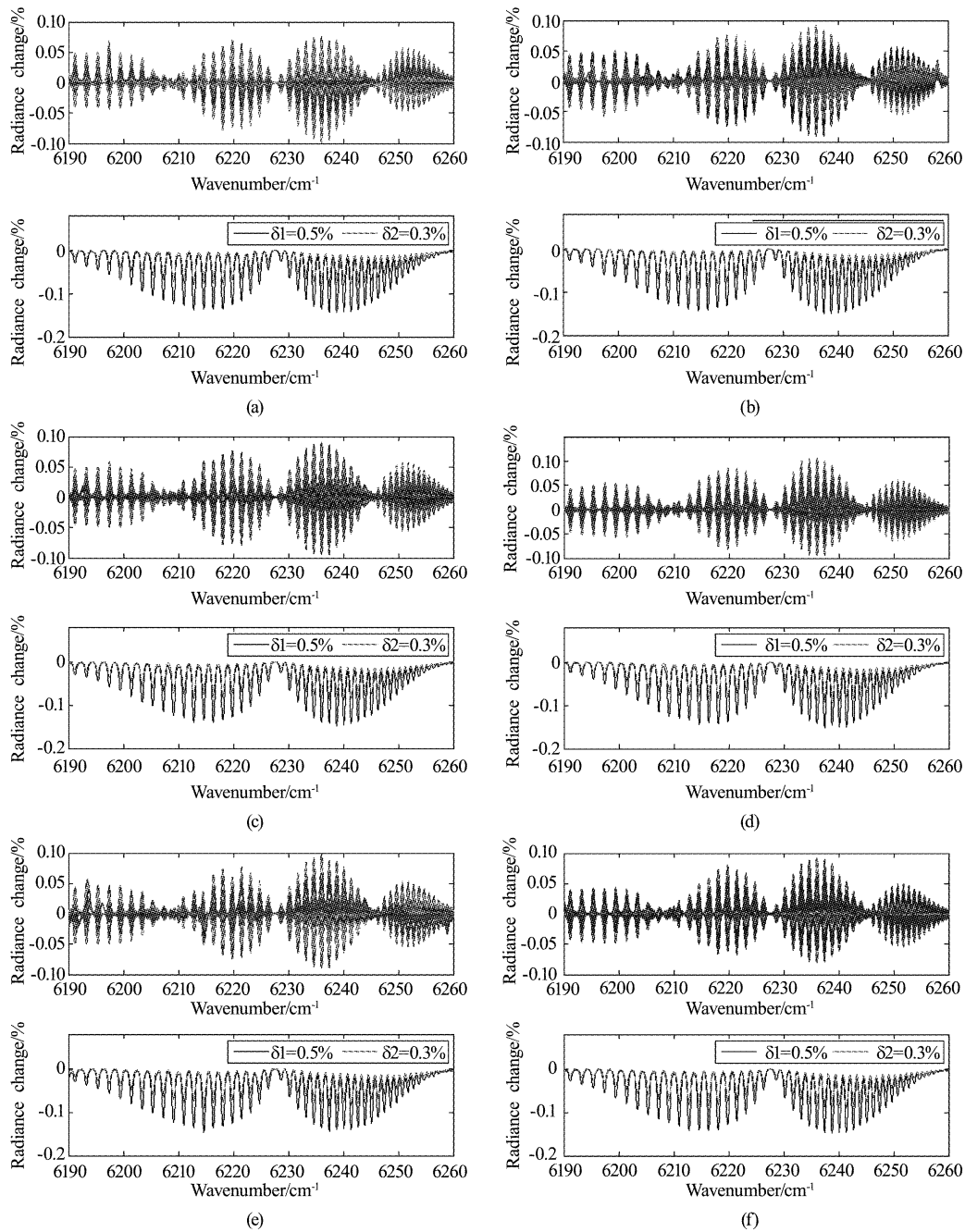


图4 1 K 温度廓线随机误差导致的不同模式大气下观测辐射值模拟变化量(a)中纬度夏季模式大气,(b)中纬度冬季模式大气,(c)副极地夏季模式大气,(d)副极地冬季模式大气,(e)热带模式大气,(f)美国标准大气

Fig.4 Variations of observations caused by 1 K random temperature error under 6 different standard atmosphere models (a) MidLatitude Summer, (b) MidLatitude Winter, (c) SubArctic Summer, (d) SubArctic Winter, (e) Tropical, (f) 1976 U. S Standard

果如表 1 所示. 从结果来看, CO<sub>2</sub> 反演浓度的变化与垂直观测模拟中 0.5%、0.3% 的浓度变化幅度相一致, 最大误差不超过 0.0096% ( ~0.037 ppm).

基于公式(7). 大气温度 1 K 随机误差导致 CO<sub>2</sub> 反演浓度变化百分比按结果大小排序如图 6 所示. 各种模式下的样本按反演误差值大小分区间统计, 可以更清楚的反映误差结果(表 2 所示).

表 1 CO<sub>2</sub> 反演浓度变化

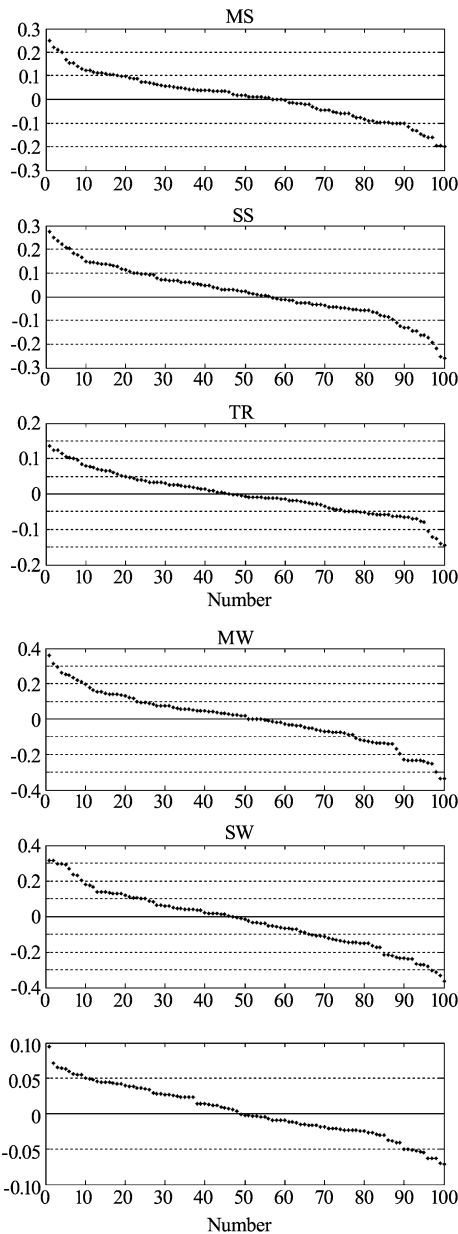
Table 1 Variations of retrieved CO<sub>2</sub>

大气模式	CO <sub>2</sub> 浓度变化比例	基于该变化获得的辐射值反演的 CO <sub>2</sub> 浓度变化	大气模式	CO <sub>2</sub> 浓度变化比例	基于该变化获得的辐射值反演的 CO <sub>2</sub> 浓度变化
MS	0.5%	0.5064%	SW	0.5%	0.4996%
	0.3%	0.2904%		0.3%	0.2982%
MW	0.5%	0.5013%	TR	0.5%	0.4993%
	0.3%	0.2963%		0.3%	0.2931%
SS	0.5%	0.5070%	US	0.5%	0.5001%
	0.3%	0.3035%		0.3%	0.3031%

表 2 样本误差统计

Table 2 Statistic of sample errors

	MS	MW	SS	SW	TR	US1976	总共
>0.30%	0	5	0	6	0	0	11
>0.20%	4	15	9	19	0	0	47
>0.15%	9	7	7	9	0	0	32
>0.10%	19	18	19	23	12	0	91
>0.05%	29	26	29	20	29	20	153
其他	39	29	36	23	59	80	266

图 6 不同模式下 CO<sub>2</sub> 反演变化百分比Fig. 6 Change ratio of retrieved CO<sub>2</sub> under different atmosphere models

由图 6 可以看到,对于模拟样本,在美国标准大气下,1 K 误差对最终 CO<sub>2</sub> 反演结果影响相对较小(最大误差约为 0.385 ppm);其他几种大气模式下,1

K 温差对 CO<sub>2</sub> 反演结果影响较大,其中中纬度冬季大气模式下,最大 CO<sub>2</sub> 反演误差可达到约 1.4 ppm. 由表 2 可以看到:1 K 温度随机误差的 600 样本当中有 266 个( ~44%)造成的 CO<sub>2</sub> 反演误差小于 0.05%,即小于 0.19 ppm;误差在 0.19 ~0.3 ppm 之间的样本约占 26%;误差在 0.3 ~0.5 ppm 之间的样本占 15%;误差大于 0.5 ppm 的占总样本 15%.

### 3 结论

温度对 CO<sub>2</sub> 吸收谱线强度的影响体现于在一定的温度范围内,CO<sub>2</sub> 的振动及转动配分函数随温度的升高而单调增强,谱线强度也随之发生变化. 谱线的 Lorentz 半宽随温度的升高而减小,相应的 Lorentz 线型的峰值相应增加;Doppler 半宽度则随温度的升高而升高,而 Doppler 线型的峰值随之减小. 对于考虑了大气混合加宽影响的 Voigt 线型,其随温度的增加,线型函数的峰值相应增加.

对水平均匀大气和垂直整层大气观测值受温度影响的模拟,结果表明:在水平均匀大气中,气温 1 K 误差造成的 CO<sub>2</sub> 吸收差异与 1 ppm CO<sub>2</sub> 浓度变化引起的差异相当;对温度廓线产品 1 K 随机误差给垂直大气观测带来影响的模拟可以看到,部分观测样本误差与 1 ppm 大气 CO<sub>2</sub> 浓度变化所引起的观测变化相当,甚至超过. 将垂直观测变化量换算成 CO<sub>2</sub> 浓度反演结果后可以看到,样本中导致 CO<sub>2</sub> 浓度反演误差小于 0.19 ppm 占大约 44%;误差在 0.19 ~0.3 ppm 之间的样本约占 26%;误差在 0.3 ~0.5 ppm 之间的样本占 15%;误差大于 0.5 ppm 的占总样本 15%. 由上面的模拟结果可以知道,温度对 1 ppm 反演精度的影响不可忽略,是影响 CO<sub>2</sub> 观测反演精度能否达到 1 ppm 的一个重要因素. 因此,在 ~385 ppm 的大气 CO<sub>2</sub> 含量背景下,CO<sub>2</sub> 的观测精度要达到 (0.3 ~0.5)% (1 ~2 ppm) 是一个巨大的挑战!

### REFERENCES

- [1] The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [C]. Cambridge: Cambridge University Press 996.
- [2] Crisp D, Allas R M, Breon F M, *et al.* The Orbiting Carbon Observatory(OCO) Mission[J]. *Advances in Space Research*, **34**, 700 - 709, 2004.
- [3] Chahine M, Barnet C, Olsen E T, *et al.* On the determination of atmospheric minor gases by the method of vanishing partial derivatives with application to CO<sub>2</sub> [J]. *Geophys. Res. Lett.*, 2005, **32**:22803,

- [4] Jianping Mao, Kawa S. R. Sensitivity studies for space-based measurement of atmospheric total column carbon dioxide by reflected sunlight [J]. *Appl. Opt.*, 2004, **43**:914 - 927.
- [5] Akihiko Kuze, Hiroshi Suto, Masakatsu Nakajima, *et al.* Thermal and near infrared sensor for carbon observation Fourier-transform spectrometer on the Greenhouse Gases Observing Satellite for Greenhouse gases monitoring [J]. *Appl. Opt.*, 2009, **48**:6716 - 6733.
- [6] Miller C. E, Crisp D, DeCola P L, *et al.* Precision requirements for space-based X<sub>CO<sub>2</sub></sub> data [J]. *J. Geophys. Res.*, 2007, **112**:10134.
- [7] Susskind J, Barnet C, Blaisdell J. Determination of atmospheric and surface parameters from simulated Atmospheric Infrared Sounder (AIRS)/Advanced Microwave Sounding Unit (AMSU)/Humidity Sounder Brazil (HSB) sounding data: retrieval and cloud clearing methodology [J]. *Adv. Space Res.* 1998, **21**:369 - 384.
- [8] McClatchey R A, Benedict W S, Clough S A, *et al.* AF-CRL atmospheric absorption line parameters compilation [J]. *Environ. Res. Pap.* 1973, **434**:78 .
- [9] Goody R M, Yung Y L. Atmospheric radiation theoretical basis [M]. New York :Oxford University Press, 1989: 96 - 100.
- [10] Drayson S R. Rapid computation of the voigt profile [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 1976, **16**:611 - 614.
- [11] Yokota T. Preliminary study on a nadir looking SWIR FTR of GOSAT project to monitor CO<sub>2</sub> column density from space, [C]. 11<sup>th</sup> International Workshop on ASSFTS, Bad Wildbad, 2003, **10**, 8 - 10

(上接 415 页)

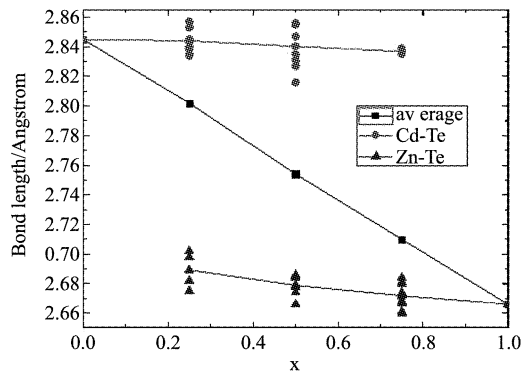


图5 平衡条件下 Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te 合金中 Cd-Te 和 Zn-Te 键长与成分比的对应关系

Fig. 5 Equilibrium bond length of Cd-Te and Zn-Te as a function of composition in Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te alloys

光学带隙和总能,并根据计算结果研究了 Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te 合金的光学带隙下凹参数、形成焓以及键长统计等问题.在对无序合金的结构研究中,借用了 SQS 结构模型.得到以下结论:通过对 Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te 合金的光学带隙分析得出光学带隙下凹参数为 0.266 eV;通过对 Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te 合金的形成焓分析发现 Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te 合金具有较高的形成焓,特别是在 x = 0.5 时,表明实验中要形成 Cd<sub>0.5</sub>Zn<sub>0.5</sub>Te 的合金需要较高的能量;通过对弛豫后 SQS 结构中的 Cd-Te 键和 Zn-Te 键的键长的统计,发现每种类型键的键长总体上保持和二元组化合物中的一致,这将导致合金中各个原子存在较大的弛豫,这也是合金具有较大形成焓的主要原因.

## REFERENCES

- [1] BUTLER J F, DOTY F P, APOTOVSKY B. Gamma and

x-ray detectors manufactured from Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te grown by a high-pressure Bridgman method [J]. *Materials Science and Engineering B*, 1993, **16**(3):291 - 295.

- [2] CHANDRA D, SHIH H D, AQARUDEN F. Formation and control of defects during molecular beam epitaxial growth of HgCdTe [J]. *Journal of Electronic Materials*, 1998, **27**(6): 640 - 647.
- [3] FRANC J, MORAVEC P, BELAS E, *et al.* Determination of energy gap in Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te (x = 0 - 0.06) [J]. *Semiconductor Science and Technology*, 2000, **15**(6): 561 - 564.
- [4] DUAN He. Study of the first-principle of Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te alloys [J]. *J. Infrared. Millim. Waves* (段鹤.碲镉锗(Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te)材料的第一性原理研究.红外与毫米波学报), 2006, **27**(12): 15 - 19.
- [5] HEYD J, SCUSERIA G E, ERNZERHOF M. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2003, **118**(18):8207 - 8216.
- [6] HEYD J, KRUKAU A V, SCUSERIA G E. Importance of short-range versus long-range Hartree-Fock exchange for the performance of hybrid density functionals [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2006, **125**(7):4106 - 4115.
- [7] ERNZERHOF M, SCUSERIA G E. Assessment of the Perdew-Burke-Ernzerhof exchange-correlation functional [J]. *Journal of Chemical Physics*, 1999, **110**(11):5209 - 5217.
- [8] HENDERSON T M, PAIER J, SCUSERIA G E. Accurate treatment of solids with the HSE screened hybrid [J]. *Physica Status Solidi B*, 2011, **248**(4):767 - 774.
- [9] ZUNGER A, WEI S H, FERREIRA L G, *et al.* Electronic properties of random alloys: Special quasirandom structures [J]. *Physical Review B*, 1990, **42**(15):9622 - 9649.
- [10] HUBBARD H J, SCHLOM D G. Thermodynamic stability of binary oxides in contact with silicon [J]. *Journal of Materials Research*, 1996, **11**(11):2757 - 2776.
- [11] DUAN He, CHEN Xiao-Shuang, HUANG Yan, *et al.* Composition-dependent electronic properties, optical transitions, and anionic relaxations of Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te alloys from first principles [J]. *Physical Review B*, 2007, **76**(3): 5209 - 5221.
- [12] SIVARAMAN G. Characterization of Cadmium Zinc Telluride solar cells [D]. Tampa: University of South Florida, 2003.