

铁硅化合物 β -FeSi₂ 带间光学跃迁的理论研究*

闫万珺 谢 泉[†] 张晋敏 肖清泉 梁 艳 曾武贤

(贵州大学电子科学与信息技术学院, 贵阳 550025)

摘要: 采用基于第一性原理的赝势平面波方法系统地计算了 β -FeSi₂ 基态的几何结构、能带结构和光学性质. 能带结构计算表明 β -FeSi₂ 属于一种准直接带隙半导体, 禁带宽度为 0.74eV; 其能态密度主要由 Fe 的 3d 层电子和 Si 的 3p 层电子的能态密度决定; 利用计算的能带结构和态密度分析了带间跃迁占主导地位的 β -FeSi₂ 材料的介电函数、反射谱、折射率以及消光系数等光学性质计算结果, 复介电函数的计算结果表明 β -FeSi₂ 具有各向异性的性质; 吸收系数最大峰值为 $2.67 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$.

关键词: β -FeSi₂; 电子结构; 光学特性

PACC: 7125; 7115H; 7820D

中图分类号: TN304

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)09-1381-07

1 引言

铁硅化合物 β -FeSi₂ 是一种新型环境半导体光电子材料, 具有光通信最适合的红外线波长 (1.55 μm), 对于红外波长有很高的吸收率, 理论的光电转换效率可达 16% ~ 23%. 近年来 β -FeSi₂ 在低温下波长为 1.5 μm ^[1] 和室温下波长为 1.6 μm ^[2] 的电致发光现象被陆续报道, 它作为一种潜在的高性能光电子材料再次成为科研热点, 是目前最引人瞩目的半导体光电子材料之一.

光电子材料的光电性能主要由介电函数、折射率、光电导率、吸收系数等表征, 而这些光学常数由费米面附近的能带结构、载流子浓度和迁移率等决定. 因此, 对其能带结构的研究是关系到 β -FeSi₂ 能否应用到光电子领域的关键问题, 其能带结构的计算已成为计算材料领域的研究热点. Eppenga^[3] 在 1990 年采用基于第一性原理的扩展球面波方法 (ASW) 对 β -FeSi₂ 的能带结构进行了计算, 得到一个带隙宽度为 0.46eV 的直接带隙和一个宽为 0.44eV 的间接带隙; Christensen^[4] 在 1990 年采用线性化的 Muffin-Tin 球轨道方法 (LMTO) 计算得到一个带隙宽度为 0.80eV 的直接带隙和一个宽为 0.77eV 的间接带隙; Eisebitt 等人^[5] 采用全电势线性化的缀加平面波方法 (FLAPW) 进行计算, 得到一个沿 $Z\Gamma$ 的对称点处宽 0.78eV 的直接带隙, 在

Y 点得到一个宽为 0.82eV 的直接带隙; Filonov 等人^[6] 采用 LMTO 法, 利用不同原子位上不同的原子球半径比, 得到宽为 0.74eV 的直接带隙. 国内仅有上海交通大学的潘志军等人^[7] 采用 FLAPW 方法对 β -FeSi₂ 的能带结构进行了计算, 得到在能带点 H 处带隙宽度为 0.74eV 的直接能隙, 在点 H 与 $\Lambda/3$ 之间带隙值为 0.71eV 的间接能隙.

目前, 尽管对 β -FeSi₂ 的电子结构进行了大量的理论和实验研究, 但是关于它的发光机理的研究报道较少, 光学性质的理论研究也很少. 只有 Filonov 等人^[8] 采用 LMTO 方法对 β -FeSi₂ 的介电函数、折射率和反射率及 Antonov 等人^[9] 采用线性化的 Muffin-Tin 球轨道原子球近似方法 (LMTO ASA) 对 β -FeSi₂ 的介电函数、反射率和光电导率进行了计算研究; 而吸收系数和电子能量损失函数的理论研究尚未见报道. 本文采用目前计算机模拟实验中最先进、最重要的赝势能带方法, 对 β -FeSi₂ 的能带结构、介电函数、吸收系数、折射率、反射率和能量损失函数进行了全面的计算, 并对其能带结构和发光机理之间的联系进行了探讨.

2 理论模型与计算方法

2.1 理论模型

β -FeSi₂ 属于正交晶系, 空间群为 $Cmca$, 每个原

* 国家自然科学基金(批准号:60566001), 教育部博士点专项科研基金(批准号:20050657003), 教育部留学回国科研基金(批准号:教外司(2005)383), 贵州省科技厅国际合作项目(批准号:黔科合 G(2005)400102), 贵州省教育厅重点基金(批准号:05JJ002), 贵州省留学人员科技项目(批准号:黔人项目(2004)03)及省委组织部高层次人才科研资助项目

[†] 通信作者. Email: quanxiengz@gzu.edu.cn

2007-03-15 收到, 2007-04-05 定稿

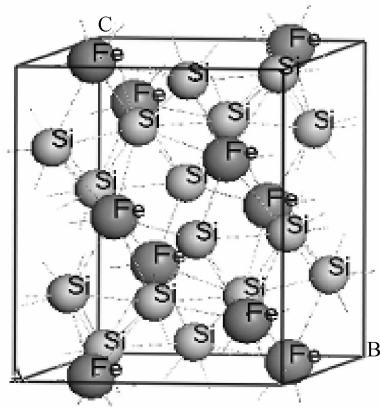


图 1 β -FeSi₂ 的原胞
Fig.1 Primitive cell of β -FeSi₂

胞包含 48 个原子,其中有 16 个 Fe 原子,32 个 Si 原子,晶格常数为 $a = 0.9863\text{nm}$, $b = 0.7791\text{nm}$, $c = 0.7833\text{nm}$ ^[10]. Fe 原子和 Si 原子在原胞中各有两种不同的原子环境,即两套不等价的 Fe, Si 原子通过对称变换而构成整个晶胞,如图 1 所示.

2.2 计算方法

文中所有的计算都是由 CASTEP 软件包^[11]完成的. CASTEP 软件是一个基于密度泛函方法的从头算量子力学程序. 利用总能量平面波赝势方法,将离子势用赝势替代,电子波函数通过平面波基组展开,电子-电子相互作用的交换和相关势由局域密度近似(LDA)或广义梯度近似(GGA)进行校正,它是目前较为准确的电子结构计算的理论方法.

密度泛函理论中,单电子运动的薛定谔方程可以表示为(原子单位):

$$\left\{ \frac{-\nabla^2}{2} - \sum_q \frac{Z_q}{|r-R_q|} + \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' + V_{xc}(r) \right\} \times \Phi_i(r) = \varepsilon_i \Phi_i(r) \quad (1)$$

$$\rho(r) = \sum_i n_i |\Phi_i(r)|^2 \quad (2)$$

其中 Z_q 为核电荷; $\Phi_i(r)$ 表示单电子波函数; n_i 表示本征态的电子占据数; $\rho(r)$ 表示多电子密度. (1)式中第 1 项代表体系中有效电子动能;第 2 项代表原子核对电子的吸引能,其具体形式采用规范保持赝势(norm-conserving pseudopotentials)表达;第 3 项是电子之间的库仑能;第 4 项是交换和相关能,其具体形式可由局域密度近似和广义梯度近似等表示.

在模拟过程中,采用周期性边界条件,单电子轨道波函数满足布洛赫(Bloch)定理,采用平面波基组展开为:

$$\Phi_i^k(r) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \sum_g c_i^k(g) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (3)$$

式中 \mathbf{g} 是原胞的倒格矢; k 是第一布里渊(Brillouin)区的波矢; $c_i^k(g)$ 是单电子轨道波函数的傅里叶(Fourier)级数.

计算用的晶格常量都为实验值,计算采用了赝势(Pseudopotential)平面波方法,对 β -FeSi₂ 的能带结构、态密度及光学性质进行了计算. 采用 BFGS 算法^[12] (由 Broyden, Fletcher, Goldfarb 和 Shanon 提出的一种能对固定外应力的晶胞进行优化的算法)对体系的晶格常数进行了优化. 将原胞中的价电子波函数用平面波基矢进行展开,并设置平面波截断能量为 400eV,使原胞的总能量收敛达到 1meV/atom. 选取局域密度近似(LDA)来处理交换关联能部分,交换关联势采用 Ceperley-Alder^[13] 和 Perdew-Zunger^[14] 给出的公式,根据 Lin 等人^[15] 优化方法生成了 Kleinman-Bylander^[16] 形式的模守恒赝势(Norm-conserving pseudopotentials),布里渊区积分采用 Monkhorst-Pack^[17] 形式的高对称特殊 k 点方法,计算中使用了 8 个对称的 k 点. 能量计算都在倒易空间中进行,为了得到稳定精确的计算结果,采用了先优化晶胞的结构,得到晶胞参量后,再优化其内部原子坐标的方法.

2.3 光学性质的理论描述

在线性响应范围内,固体宏观光学响应函数通常可以由光的复介电常量 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ 或复折射率 $N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$ 来描述. 其中

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2 \quad (4)$$

$$\varepsilon_2 = 2nk \quad (5)$$

根据直接跃迁几率的定义和克拉默斯-克勒尼希(Kramers-Kronig)色散关系可以推导出晶体介电函数虚部、实部、吸收率和反射率等,具体推导过程^[18]不再赘述. 给出与本文有关的结果:

$$\varepsilon_2 = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{v,c} \int_{\text{BZ}} d^3 k \frac{2}{(2\pi)} | \mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{cv}(\mathbf{K}) |^2 \delta[E_c(k) - E_v(k) - \hbar\omega] \quad (6)$$

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{8\pi^2 e^2}{m^2} \sum_{v,c} \int_{\text{BZ}} d^3 k \frac{2}{(2\pi)} \times \frac{| \mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{cv}(\mathbf{K}) |^2}{[E_c(k) - E_v(k)]} \times \frac{\hbar^3}{[E_c(k) - E_v(k)]^2 - \hbar^2 \omega^2} \quad (7)$$

$$I(\omega) = \sqrt{2\omega} [\sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 - \varepsilon_2(\omega)^2} - \varepsilon_1(\omega)]^{1/2} \quad (8)$$

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (9)$$

其中 C, V 分别表示导带和价带; BZ 为第一布里渊区; \mathbf{K} 为倒格矢; $| \mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{cv}(\mathbf{K}) |$ 为动量跃迁矩阵元; ω 为角频率; $E_c(k), E_v(k)$ 分别为导带和价带上的本征能级. 以上关系是分析晶体能带结构和光学性质的理论依据,它反映了能级间电子跃迁所产生光谱的发光机理. 而且从某种意义上说,复介电响

表1 β -FeSi₂ 优化几何结构参数Table 1 Experimental and calculational lattice constants of β -FeSi₂

	a/nm	b/nm	c/nm
实验值	0.9863	0.7791	0.7833
理论值	0.9764	0.7671	0.7720
误差/%	1.00	1.54	1.44

应函数 $\epsilon(\omega)$ 比宏观光学常数更能表征材料的物理特性,更易于与物理过程的微观模型及固体的微观电子结构联系起来。

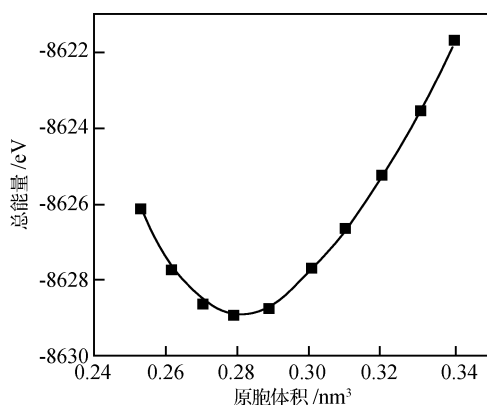
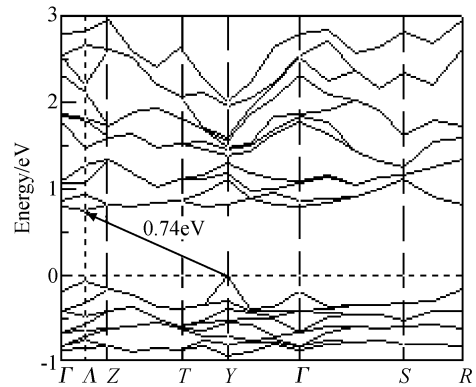
3 计算结果与讨论

3.1 体系优化

为了得到体系的稳定结构,在 β -FeSi₂ 实验晶格常数值附近对原胞体积和总能量进行了优化计算,通过计算这些不同原胞体积下体系的总能量,给出了 β -FeSi₂ 原胞体积与总能量间的关系曲线图,如图2所示.优化前后晶格常数的对比如表1所示.由图2可见, β -FeSi₂ 的总能量在原胞体积为 0.2798nm^3 时达到最小值,此时所对应的晶格常数为 $a = 0.9764\text{nm}$, $b = 0.7671\text{nm}$, $c = 0.7720\text{nm}$ 与实验值相比误差在 $1\% \sim 1.54\%$ 之间.本文以下的计算结果都是在这个平衡晶格常数下给出的。

3.2 能带结构

采用优化后的晶格常数,利用 LDA 近似处理交换关联泛函,模守恒赝势处理离子实与价电子之间的相互作用,平面波基组描述体系电子的波函数,通过计算得到了 β -FeSi₂ 沿布里渊区高对称点方向的能带结构.图3为 β -FeSi₂ 禁带附近的能带结构的片段,图中选取费米能级为零点.第一布里渊区中高

图2 β -FeSi₂ 原胞体积与总能量间关系曲线Fig.2 Function of total energy of β -FeSi₂ as primitive cell volume图3 β -FeSi₂ 禁带附近的能带结构Fig.3 Fragment band structure of β -FeSi₂ near the gap

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。

表2 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Table 2 Eigenvalues of the top of the valences (E_V) and bottom of the conduction (E_C) bands at high-symmetry points of the Brillouin zone

	Γ	Z	T	Y	Δ	S
E_V	-0.201	-0.176	-0.396	0.0	-0.065	-0.338
E_C	0.789	0.823	0.867	0.821	0.740	1.106

由表2可以看出, β -FeSi₂ 的能带在价带的 Y 点得到最大值 0eV ,而在导带的 Δ 点(即 ΓZ 之间)取得最小值 0.74eV ,因此 β -FeSi₂ 在价带的 Y 点到导带的 Δ 点表现出间接带隙半导体的性质,带隙宽度 $E_g = 0.74\text{eV}$.但是我们注意到,价带顶的 Δ 点的特征能量值仅比 Y 点的值小 65meV ,即 β -FeSi₂ 的间接带隙只比靠近的直接带隙的值低 65meV ,在 Δ 点 β -FeSi₂ 表现出准直接带隙半导体的性质.这个计算结果与其他理论计算结果^[3~7,19]是一致的。

3.3 电子态密度

计算中 β -FeSi₂ 的 Fe 原子的 $3d6\ 4s2$ 为价电子, Si 原子的 $3s2\ 3p2$ 为价电子.图4为 β -FeSi₂ 的总态密度图(DOS)和 Fe, Si 的部分态密度图(PDOS)。

从图4可见,在电子能量较小的范围($-13.7 \sim -5\text{eV}$), β -FeSi₂ 的态密度主要由 Si 的 $3s$ 态电子构成;在 $-5 \sim 0\text{eV}$ 的能量范围, β -FeSi₂ 的态密度主要由 Fe 的 $3d$ 态电子构成, Si 的 $3p$ 态电子也有所贡献;费米能级 E_F 处的态密度贡献主要来自于 Fe 的 $3d$ 态电子和 Si 的 $3p$ 态电子, Si 的 $3s$ 态电子对费米能级处的态密度基本没有什么贡献,而且在整个能量范围内贡献都相对较小;在能量大于 0eV 的范围

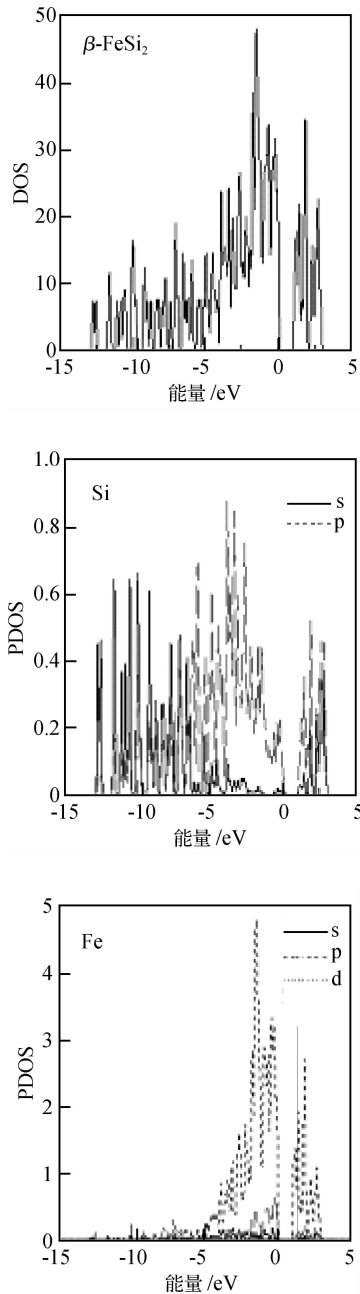


图 4 β -FeSi₂ 总态密度以及 Si、Fe 各亚层电子的态密度
Fig.4 Total and projected density of states of Fe and Si

β -FeSi₂ 的态密度主要由 Fe 的 3d 态电子和 Si 的 3p 态电子共同构成,价带的延展从 0 到 -13.7eV,最大的峰值出现在能量为 -1.61eV 的位置.由此可以看出, β -FeSi₂ 的电传输性质及载流子类型主要由 Si 的 3p 层电子及 Fe 的 3d 层电子决定.

3.4 光学特性

3.4.1 β -FeSi₂ 复介电函数

介电函数作为沟通带间跃迁微观物理过程与固

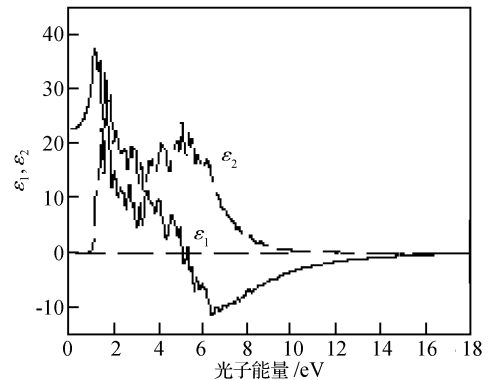


图 5 β -FeSi₂ 的介电函数的实部 ϵ_1 和虚部 ϵ_2

Fig.5 Real part ϵ_1 and imaginary part ϵ_2 of the dielectric function of β -FeSi₂

体电子结构的桥梁,反映了固体能带结构及其它各种光谱信息^[18]. β -FeSi₂ 作为半导体材料,其光谱是由能级间电子跃迁所产生的,各个介电峰可以通过 β -FeSi₂ 的能带结构和态密度来解释.

图 5 为计算的 β -FeSi₂ 的介电函数实部 ϵ_1 和虚部 ϵ_2 . $\epsilon_2(\omega)$ 的第一峰值主要是由最高的价带到最低的导带间的电子跃迁产生的,由图 5 可知,在能量为 1.83eV 处 ϵ_2 达到第一峰值,对应于能带图上价带顶到导带底的电子跃迁. Filonov 等人^[8] 的实验测得在 1.9eV 时 ϵ_2 取得极大值,且与 Antonov 等人^[9] 的实验结果相符较好.计算所得 ϵ_2 的峰值相对实验值向低能区有偏移,这主要是由于所采用的 LDA 计算方法导致的,在仅对于主要表现出金属 d 壳层特征的带隙附近的单电子态来说 LDA 是足够准确的,而对于带隙之外存在杂化的情况 LDA 计算就变得不够准确了.

图 6 为介电函数沿 a, b, c 极化的情况.从图 6 可以看出,第一次可观测的跃迁发生在 0.8eV 附近,随着光子能量的增大 ϵ_2 急剧增大.一个主要特征是沿 a, b, c 方向极化时 ϵ_2 分别在 1.48, 1.74 和 1.80eV 达到第一峰值,这主要来自铁、硅 $d-p$ 电子从价带到导带的跃迁.在高能区可以看到 ϵ_2 的值有减小的趋势,沿 a 方向极化的 ϵ_2 在 5.17eV 达到第二峰值,值得注意的是沿 b, c 方向极化时 ϵ_2 在第二峰值的缺失表明 β -FeSi₂ 在这个能量范围存在各向异性的特性.

3.4.2 β -FeSi₂ 吸收谱

吸收系数表示光波在介质中单位传播距离光强度衰减的百分比.利用介电函数和吸收系数的关系 $\alpha = \frac{\omega}{nc} \epsilon_2$,可以得到 β -FeSi₂ 的吸收系数(图 7).由图 7 可知,在能量低于 0.74eV 以及能量大于 16.3eV 的范围吸收为零,表明在波长小于 1770nm 和波长

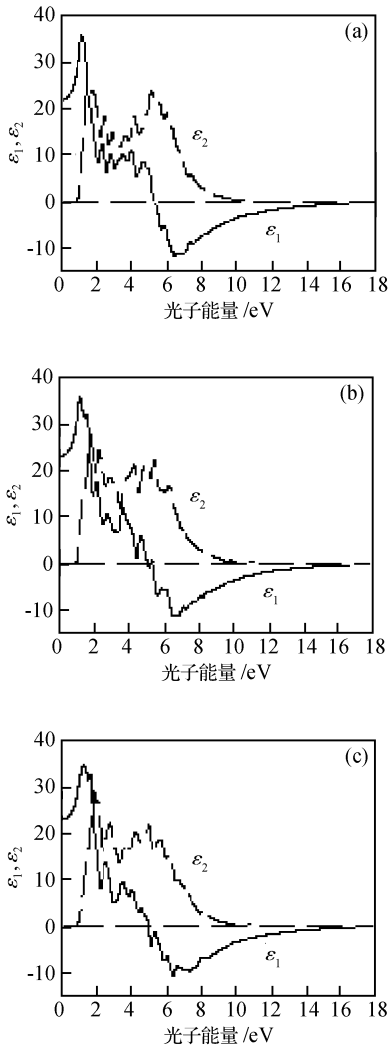


图 6 β -FeSi₂ 的介电函数沿 a, b, c 方向极化后的情况
Fig.6 Real (ϵ_1) and imaginary (ϵ_2) parts of the dielectric function of β -FeSi₂ for a, b, c light polarization

大于 76nm 的范围 β -FeSi₂ 是透明的. 当光子能量大于 0.74eV 后吸收系数开始增大, 与计算得到的间接带隙 0.74eV 相对应. 吸收系数在能量为 6.26eV 处达到最大峰值 $2.67 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$, 能量大于 6.26eV 后吸收系数随着光子能量的增加逐渐减小, 能量达到 16.3eV 时吸收系数减小到零.

3.4.3 β -FeSi₂ 复折射率

由复折射率和介电函数的关系 $n^2 - k^2 = \epsilon_1$, $2nk = \epsilon_2$, 得到 β -FeSi₂ 的复折射率. 图 8 为 β -FeSi₂ 的折射率 n 和消光系数 k . 由图 8 可知, 折射率 $n_0 = 4.2$, 与 Filonov 等人^[8] 的结果相符较好. n 的主要峰值出现在能量为 1.15~1.64eV 范围内, 最大峰值处对应的光子能量的值为 1.15 和 1.38eV, 光子能量大于 1.64eV 后折射率随光子能量的增加逐渐减小. 由图 5 可知在能量处于 8~12eV 的范围内 $\epsilon_1(\omega) < 0$, 从波矢方程 $\omega^2 \epsilon = c^2 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k})$ (c 为真空中

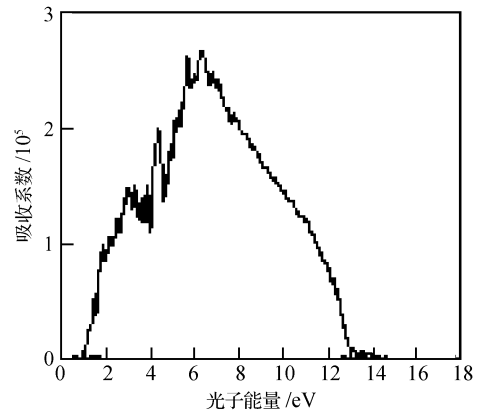


图 7 β -FeSi₂ 的吸收系数
Fig.7 Absorption of β -FeSi₂

的光速)可以看出, 对于实的 $\omega, \epsilon_1(\omega) < 0$ 意味着波矢 \mathbf{k} 为虚数, 也就是说, 在此频域内光不能在固体中传播; 由(4)式看出, 在这一频域内 $k(\omega) \gg n(\omega)$, 实际上 n 趋于 0, 此时反射率趋近于 1, β -FeSi₂ 呈现出金属反射特性. 吸收系数和消光系数之间的关系为:

$$\alpha = \frac{2k\omega}{c} = \frac{4k\pi}{\lambda_0}, \lambda_0 \text{ 为光电磁波在真空中的波长. 与}$$

吸收系数相对应, β -FeSi₂ 的消光系数在能量低于 0.74eV 以及能量大于 16.3eV 的范围为零, k 的主要峰值出现在能量为 1.86~6.26eV 范围内, 能量大于 6.26eV 后消光系数随光子能量的增加而减小, 在光子能量达到 16.3eV 时消光系数 k 减小到零. 同时, 消光系数在带边表现出强烈的吸收特征.

3.4.4 β -FeSi₂ 反射谱

光由空气直接垂直入射到具有复折射率的介质中, 即 $n_1 = 1, n_2 = n + ik$, 可得到反射比与复折射率的关系(如(9)式), 可知反射比 R 仍主要决定于折射率 n . 图 9 为 β -FeSi₂ 的反射谱, 可以看出在能量 1.15~4.6eV 范围内有部分反射发生, 反射谱带

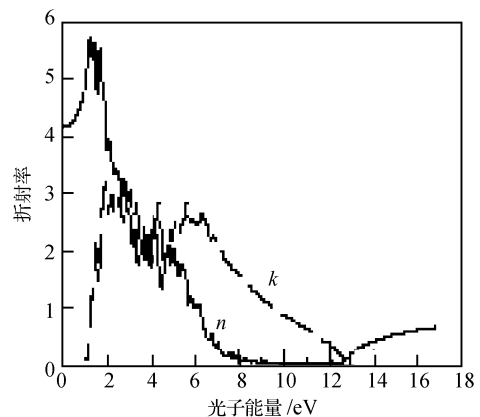


图 8 β -FeSi₂ 的复折射率
Fig.8 Refractivity index of β -FeSi₂

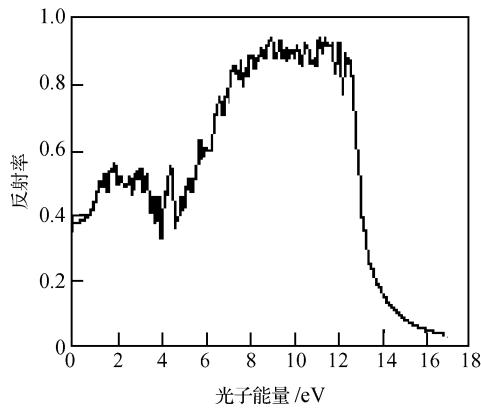


图 9 β -FeSi₂ 的反射谱
Fig.9 Reflectivity of β -FeSi₂

间跃迁主要发生在 8~12eV 的高能区,反射率趋近于 1,这是由于在这一能量范围内 β -FeSi₂ 呈现出金属反射特性,入射的光大部分被反射了,对应折射率 n 的值趋于零.根据此次计算结果可知, β -FeSi₂ 的价带电子态分布是不均匀的,主要由 Si 3s 态贡献的下价带区(-13.7~-5eV)和 Fe 3d 态贡献的上价带区(-5~0eV)其态密度表现出强烈的局域化特征,对 β -FeSi₂ 的电子结构及其成键特征有重要影响.

3.4.5 β -FeSi₂ 损失函数

从介电常数虚部可以进一步得到材料电子的能量损失函数,它描述了电子通过均匀的电介质时能量损失的情况,计算式为: $L(\omega) = \text{Im} \left(\frac{-1}{\epsilon(\omega)} \right) = \frac{\epsilon_2(\omega)}{[\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)]}$. 损失函数的峰值代表与等离子体振荡相关联的特性,相应的振荡频率称为等离子体频率.图 10 为 β -FeSi₂ 的电子能量损失函数.由图 10 可知,在能量小于 0.74eV 时 β -FeSi₂ 的电子能量

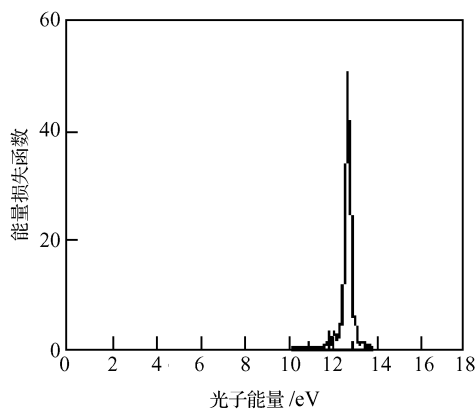


图 10 β -FeSi₂ 的电子能量损失函数
Fig.10 Electric loss function of β -FeSi₂

损失为零,其最大的能量损失峰值为 12.8eV,对应于 β -FeSi₂ 体相等离子体边缘能量.另外,根据计算的 Si 和 Fe 部分态密度可知,在 11.8, 12.2 和 13.5eV 处的次能量损失峰值来源于 Si 3s 到 Fe 3d 的能级跃迁.

4 结论

本文利用基于密度泛函理论的赝势平面波方法对 β -FeSi₂ 的能带结构和光学性质进行了计算.计算结果表明 β -FeSi₂ 为典型的半导体,其能带结构点 Y 处的直接能隙为 0.82eV,点 Y→TZ 间的间接能隙为 0.74eV;其态密度主要由 Fe 的 3d 层电子和 Si 的 3p 层电子的态密度决定;复介电函数的计算表明 β -FeSi₂ 具有各向异性的性质;吸收系数在光子能量为 6.26eV 处达到最大峰值 $2.67 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$;折射率 $n_0 = 4.2$,消光系数随光子能量的变化与吸收谱完全对应,在带边表现出强烈吸收特征;对反射谱和电子能量损失谱与计算所得态密度的关系进行了分析,结果表明 β -FeSi₂ 的价带电子态分布是不均匀的,主要由 Si 3s 态贡献的下价带区(-13.7~-5eV)和 Fe 3d 态贡献的上价带区(-5~0eV)其态密度表现出强烈的局域化特征,对 β -FeSi₂ 的电子结构及其成键特征有重要影响.

参考文献

- [1] Dimitriadis C A, Werner J H, Logothetidis S, et al. Electronic properties of semiconducting FeSi₂ films. *J Appl Phys*, 1990, 68(4): 1726
- [2] Suemasu T, Negishi Y, Takakura K, et al. Room temperature 1.6 μ m electroluminescence from a Si-Based light emitting diode with β -FeSi₂ active region. *Jpn J Appl Phys, part 2*, 2000, 39: L1013
- [3] Eppenga R. ab initio band-structure calculation of the semiconductor β -FeSi₂. *J Appl Phys*, 1990, 68(6): 3027
- [4] Christensen N E. Electronic structure of β -FeSi₂. *Phys Rev B*, 1990, 42(11): 7148
- [5] Eisebitt S, Rubensson J E, Nicodemus M, et al. Electronic structure of buried α -FeSi₂ and β -FeSi₂ layers; soft-X-ray-emission and -absorption studies compared to band-structure calculations. *Phys Rev B*, 1994, 50(24): 18330
- [6] Filonov A B, Migas D B, Shaposhnikov V L, et al. Electronic and related properties of crystalline semiconducting iron disilicide. *J Appl Phys*, 1996, 79(10): 7708
- [7] Pan Z J, Zhang L T, Wu J S. A first principle study of electronic and geometrical structure of β -FeSi₂ with doping. *Acta Phys Sin*, 2005, 54(11): 5308 (in Chinese) [潘志军, 张澜庭, 吴建生. 掺杂半导体 β -FeSi₂ 电子结构及几何结构第一性原理研究. *物理学报*, 2005, 54(11): 5308]
- [8] Filonov A B, Migas D B, Shaposhnikov V L, et al. Theoretical and experimental study of interband optical transitions in semiconducting iron disilicide. *J Appl Phys*, 1998, 83(8): 4410

- [9] Antonov V N, Jepsen O, Henrion W. Electronic structure and optical properties of β -FeSi₂. *Phys Rev B*, 1997, 57(15): 8934
- [10] Dusausoy Y, Protas, J, Wandji R, et al. Structure cristalline du disilicure de fer, FeSi₂. *Acta Crystallogr B*, 197, 127: 1209
- [11] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J, et al. First-principles simulation; ideas, illustrations and the CASTEP code. *J Phys: Conden Matter*, 2002, 14(11): 2717
- [12] Fischer T H, Almlof J. General methods for geometry and wave function optimization. *J Phys Chem*, 1992, 96(24): 9768
- [13] Ceperley D M, Alder B J. Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Phys Rev Lett*, 1980, 45(7): 566
- [14] Perdew J P, Zunger A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. *Phys Rev B*, 1981, 23(10): 5048
- [15] Lin J S, Qteish A, Payne M C, et al. Optimized and transferable nonlocal separable ab initio pseudopotentials. *Phys Rev B*, 1993, 47(8): 4174
- [16] Kleinman L, Bylander D M. Efficacious form for model pseudopotentials. *Phys Rev Lett*, 1982, 48(20): 1425
- [17] Monkhorst H J, Pack J D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys Rev B*, 1976, 13(12): 5188
- [18] Sheng Xuechu. Spectrum and optical property of semiconductor. Beijing: Science Press, 1992 (in Chinese) [沈学础. 半导体光谱和光学性质. 第2版. 北京: 科学出版社, 1992]
- [19] Clark S J, Al-Allak H M, Brand S, et al. Structure and electronic properties of FeSi₂. *Phys Rev B*, 1998, 58(16): 10389

Interband Optical Transitions in Semiconducting Iron Disilicide β -FeSi₂ *

Yan Wanjun, Xie Quan[†], Zhang Jinmin, Xiao Qingquan, Liang Yan, and Zeng Wuxian

(College of Electronic Science & Information Technology, Guizhou University, Guiyang 550025, China)

Abstract: The geometric parameters and the electric and optical properties of β -FeSi₂ are calculated using first principle methods based on plane-wave pseudo-potential theory in detail. The results indicate that: (1) β -FeSi₂ is a quasi-direct semiconductor and the band gap is 0.74eV. The density of states is mainly composed of Fe 3d and Si 3p. (2) The valences electronic state of β -FeSi₂ is asymmetric and has a strong local area characteristic. These have an important influence on the electronic structure and the bonding characteristics of β -FeSi₂. (3) The calculation of the dielectric function reveals that β -FeSi₂ is anisotropic, the biggest peak of absorption is $2.67 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$, the extinction coefficient shows strong absorption characteristic near the band edge, and the mechanism of the electric and optical properties of β -FeSi₂ dominated by electron inter-band transitions are analyzed in terms of calculated band structure and density of states.

Key words: β -FeSi₂; electronic structure; optical properties

PACC: 7125; 7115H; 7820D

Article ID: 0253-4177(2007)09-1381-07

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 60566001), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (No. 20050657003), the Scientific Research Foundation for the Returned Overseas Chinese Scholars of the Ministry of Education of China (No. (2005)383), the International Collaborative Project of Science Technology Department of Guizhou Province (No. (2005)400102), the Key Foundation of Education Department of Guizhou Province (No. 05JJ002), the Scientific and Technological Projects for the Returned Overseas Chinese Scholars of Guizhou Province (No. (2004)03), and the Top Talent's Scientific Research Project of Organization Department of Guizhou Province

[†] Corresponding author. Email: quanxieqz@gzu.edu.cn

Received 15 March 2007, revised manuscript received 5 April 2007

©2007 Chinese Institute of Electronics