

掺稀土元素(Y, La)的 γ - Si_3N_4 的电子结构和光学性质

丁迎春^{1)†} 向安平¹⁾ 徐 明^{2)†} 祝文军^{2)‡}

1) 成都信息工程学院光电技术系, 成都 610225)

2) 四川师范大学物理与电子工程学院固体物理研究所, 成都 610068)

3) 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理重点实验室, 绵阳 621900)

(2007 年 1 月 18 日收到, 2007 年 2 月 8 日收到修改稿)

采用基于密度泛函的平面赝势方法(PWP)和广义梯度近似(GGA), 计算了未掺杂和掺杂稀土(Y, La)的 γ - Si_3N_4 中 N-(La) 键的布居值和它们的键长、掺杂后能带结构和态密度. 发现掺杂后的带隙要减小, 并且可能形成新的半导体, 这将为找到新的半导体提供一个方向. 还进一步研究了掺杂稀土(Y, La)后的光学性质, 掺杂后有更高的静态介电常数, 可以作为新的介电材料和好的折射材料, 这对于一定的光学元件有潜在的应用前景.

关键词: γ - Si_3N_4 , 掺杂, 电子结构, 光学性质

PACC: 7155, 7115H, 6170T

1. 引 言

Si_3N_4 是一种人工合成的陶瓷材料, 19 世纪末才发现, 但是一直缺少深入的研究. 直到 20 世纪 90 年代中期才发现 β 相的 Si_3N_4 ^[1], 1999 年发现它的第三相 γ - Si_3N_4 ^[2], 2001 年又发现了 Si_3N_4 的另一相 δ - Si_3N_4 ^[3]. Si_3N_4 材料在微电子工业、光电子工业、机械工业、汽车工业、化工、太阳能电池、陶瓷切削加工工具、高推重比航空发动机等方面具有广泛的应用, 它是一种重要的建筑材料, 在硅技术中利用它作为绝缘层. 四种结构中, α 和 β 相属六角晶系, 它们的无定型薄膜已经得到了利用. γ 相属立方晶系, 实验是在高温(2000 K)高压(15 Gpa)下合成的^[4], 由于实验条件的限制, 所以还没有得到更好的应用.

γ - Si_3N_4 作为一种新的结构陶瓷, 具有非常令人感兴趣的物理性质. α - Si_3N_4 和 β - Si_3N_4 具有较大的带隙, 是间接带隙. 第一性原理计算得到的 γ - Si_3N_4 的带隙为 3.45 eV, 是直接带隙, 而且比 α 和 β 相 Si_3N_4 材料具有更大的共价性和更高的静态介电常数, 并具有高的硬度和好的热稳定性^[5]. 直接带隙暗

示它在光学和电子装置中存在潜在的运用. 本工作将对 γ - Si_3N_4 作进一步研究, 用第一性原理方法研究 γ - Si_3N_4 掺杂稀土元素(Y, La), 得到的结果表明这有利于找到新的半导体材料.

在 γ - Si_3N_4 被发现后, 在实验和理论方面, 人们对它进行了深入研究, 并研究了它的掺杂改性. 2001 年, Oba 等人^[6]用第一性原理对 γ - Si_3N_4 进行 n 型和 p 型掺杂, 计算得出 P 和 O 是好的 n 型掺杂物, Al 是好的 p 型掺杂物. 2002 年, 他们用相同方法再次对 γ - Si_3N_4 和 γ - Ge_3N_4 进行掺杂的研究^[7]. Ching 等人^[4]对 γ 相氮化物进行研究, γ - Si_3N_4 中阳离子 Si 存在四面体位和八面体位, 分别用过渡金属 Zr, Hf 和 Ti 原子对四面体位和八面体位进行取代研究. 得出结论: 离子的半径大(与被替代原子相比较)就很容易占据它的八面体位, 而小的离子半径就很容易去占据它的四面体位置. Ching 等人^[8]又进行了研究, 在 56 个超晶胞(2 × 2 × 1)的 γ - Si_3N_4 的内部, 在八面体位(Ti 的原子半径大于 Si 原子半径)掺入了 1 3 5 7 8 个 Ti 原子. 随着掺杂的原子增多, 物质会变成半导体最后已经变成了金属. 2004 年 Ziegler 等人^[9]对 Si_3N_4 薄膜加入稀土氧化物(Y_2O_3 , La_2O_3 等)进行烧结, 这样能够改善 Si_3N_4 的性质. 稀土元素的

† E-mail: dyccqzx@yahoo.com.cn

原子大小, 电子结构和在分界面上氧的位置都对 Si_3N_4 的性质产生一定的影响. 第一性原理赝势计算方法已经广泛应用于材料的结构设计和性能计算^[10-12], 所得的结果对认识材料的性质具有一定的指导意义. 本文选择的是稀土元素(Y, La)来进行掺杂, 考虑到它们有大的原子半径, 所以计算中只对 γ - Si_3N_4 的八面体位置进行掺杂, 而且掺杂浓度也不太高, 选择只在八面体位掺杂一个原子. 实验已经研究了 Si_3N_4 膜的表面加入了稀土氧化物, 那么进一步可以考虑把稀土元素掺入到 γ - Si_3N_4 的内部. 用冲击波实验合成 γ - Si_3N_4 中, 可以考虑把一定量的稀土元素掺入其中, 这样就能实现该模型的掺杂. 由于实验要求在极端高温高压的条件下完成, 所以本文运用第一性原理赝势方法来研究该模型, 以便了解该结构的一些性质.

2. 计算模型和方法

本文采用平面波基组的赝势从头算方法, 基于密度泛函理论的 CASTEP 模块的广义梯度近似(GGA)^[13]修正方法(PW91)^[14,15], 计算了掺杂稀土钇(Y) 镧(La)的 γ - Si_3N_4 超晶胞($2 \times 1 \times 1$)结构包含了 28 个原子, 其中 11 个 Si 原子、16 个 N 原子和 1

个杂质原子. 对于掺杂的种类, 计算的是稀土元素 Y 和 La. 在超晶胞中的一个八面体的位置上的 Si 被 Y 或 La 取代. 取代时考虑到周期边界条件, 取代应该靠近原胞中心, 如在边缘八面体位置, 会对边界原子产生很大的影响. 如图 1. 在晶体周期性势场中, 采用三维周期边界条件, 将多电子体系用平面波函数展开表示. 为尽量减少平面波基个数, 采用超软赝势(USPP)^[15]来描述离子实与价电子之间的相互作用. 在倒易的 k 空间中, 平面波截止能(E_{cut})掺 Y 时选取为 230 eV, 掺 La 时选取为 220 eV. 系统总能量和电荷密度在 Brillouin 区的积分计算使用 Monkhorst-Pack^[16]方案来选择 k 网格点都为 $2 \times 4 \times 4$, 以保证体系能量和构型在准完备平面波基水平上的收敛. 在自洽场运算中, 采用了 Pulay 密度混合法, 自洽场设为 2.0×10^{-6} eV/atom. 模型的结构优化采用了 BFGS 算法^[17], 优化参数有四个: 原子间的相互作用力的收敛标准设为 0.05 eV/nm; 单原子能量的收敛标准设为 2.0×10^{-5} eV; 晶体内应力的收敛标准设为 0.1 GPa; 原子最大位移收敛标准设为 2.0×10^{-3} nm. 程序对四个参数同时进行优化, 结构优化完成的标志是四个参数均达到收敛标准. 参与计算的价态电子为: N $2s^2 2p^3$, Si $3s^2 3p^2$, Y $4s^2 4p^6 4d^1 5s^2$, La $5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$.

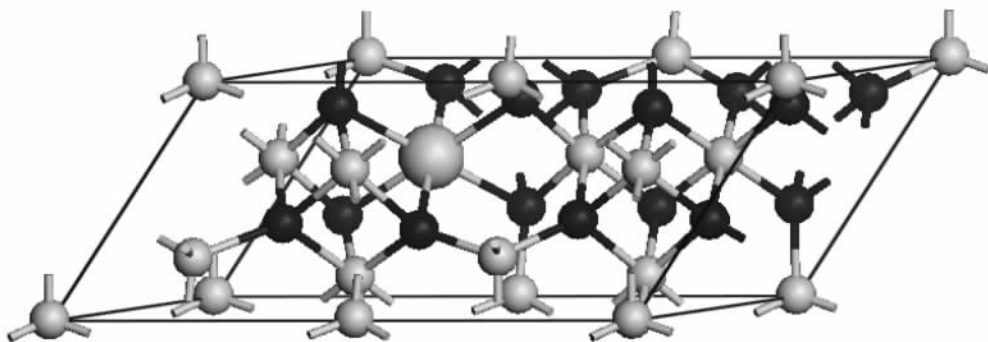


图 1 γ - Si_3N_4 掺杂的($2 \times 1 \times 1$)超晶胞 黑球代表 N, 小灰球代表 Si, 大灰球代表稀土元素(Y 或 La)

3. 计算结果和讨论

3.1. 原胞结构优化结果与布居分析

通过优化后, 自洽精度与体系能量都收敛较好, 均小于设定标准, 体系总能量达到最小, 得到各项物理参数如表 1: 用 GGA 方法计算了未掺杂的 γ - Si_3N_4 ^[18]、掺一个 Y 和掺一个 La 的超晶胞($2 \times 1 \times 1$)

表 1 γ - Si_3N_4 、掺杂钇(Y) 和镧(La)优化后的物理参数

物理参量	γ - Si_3N_4	掺 1 个 Y	掺 1 个 La
总能量/eV	-5691.525	-6631.5757	-6438.6769
$2a/\text{nm}$	1.08998	1.12163	1.14723
b/nm	0.544988	0.557265	0.569850
c/nm	0.544988	0.557280	0.569851
带隙/eV	3.58	1.62	0.76
密度($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	4.07158	4.23420	4.37059

模型. 计算得到掺 Y 的能量最低为 -6631.5757 eV , 掺 Y 掺 La 的能量要比未掺杂的 $\gamma\text{-Si}_3\text{N}_4$ 的能量低 940 eV 和 747 eV 左右. 掺杂过程中由于替代掺杂的原子半径比较大, 所以会使晶格常数增大. La 的原子半径比 Y 的原子半径要大, 所以掺 La 的晶格常数比掺 Y 的晶格常数变化大, 由表 1 可以看出如果掺杂原子半径的增大, 它们的晶格常数也要会变大. $\gamma\text{-Si}_3\text{N}_4$ 是立方晶系, 所以晶格常数 a, b, c 是应该相等的, 但是我们通过掺杂后发现, a, b, c 的大小变得不一样, a 最大, b 最小, 但是 b, c 之间的差别

很小. 掺杂后的物质带隙均变小, 逐渐变成了半导体相匹配的带隙. 特别是掺 Y 的结构带隙为 1.62 eV , 如果它和未掺杂的 $\gamma\text{-Si}_3\text{N}_4$ 相组合, 由于它们的晶格是相匹配的, 所以可以把它们作为好的太阳能电池的接受层和反射层. 可以预测到再进一步增加掺杂浓度(即增加掺杂原子的个数), 可以肯定带隙会越来越小, 最后可以变成金属. 掺杂时由于 La 的原子量比 Y 的原子量要大, 掺 La 的密度要比掺 Y 的要大.

表 2 是掺 Y 掺 La 后, 与掺杂原子周围相连的 6

表 2 N 与掺杂原子 Y, La 键的布居值和键长值

键	布居值	键长/nm	键	布居值	键长/nm
N 7—Y 1	0.08	0.212440	N 7—La 1	-0.13	0.222534
N 15—Y 1	0.09	0.211648	N 15—La 1	-0.13	0.223371
N 3—Y 1	0.07	0.215461	N 3—La 1	-0.15	0.229134
N 5—Y 1	0.07	0.215461	N 5—La 1	-0.15	0.229134
N 13—Y 1	0.07	0.215511	N 13—La 1	-0.15	0.229932
N 9—Y 1	0.07	0.215512	N 9—La 1	-0.15	0.229932

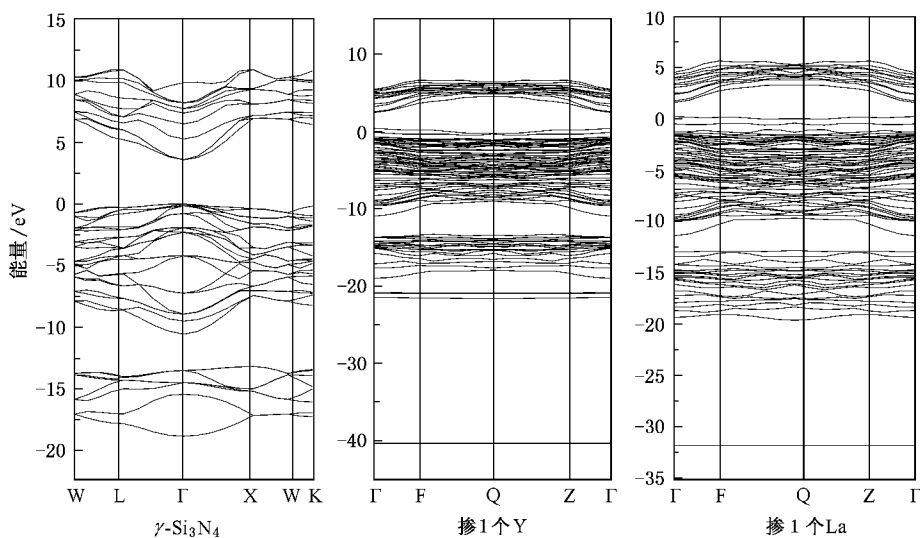
个 N 原子(如图 1)所构成的键的布居值和键长值. 未掺杂时 Si 和相连的 6 个 N 形成的 N—Si 键的布居为 0.46, 键长为 $0.187222 \text{ nm}^{[18]}$. 替代 Si 后形成的 N—Y 键、N—La 键的布居值都减小很多, 掺 Y 后布居值最小为 0.07 左右, 而掺 La 后布居值变为 -0.15 . 我们知道, 键的布居值能够判断各种价键的离子性和共价性. 高的布居值就说明此键是共价键, 而较低的布居值就说明它是离子相互作用. 在 $\gamma\text{-Si}_3\text{N}_4$ 中 N—Si 键都具有高的共价性^[5, 18], N—Y 键和 N—La 键的布居值明显减小, 甚至变成了负值, 可以说明掺杂后结构中的键 N—Y 键, N—La 键此时呈现出离子性. 在掺杂过程中, 掺杂位置上取代成为 Y, La 后, 虽然没有直接与 Si 相连, 但计算的结果中键 Si—Y, Si—La 的布居值也减小, 显示出离子性. 通过掺杂, 可以看出物质呈现出了比未掺杂是有更强的离子性.

3.2. 能带结构分析

图 2 是用 GGA 方法计算 $\gamma\text{-Si}_3\text{N}_4$ 和掺 Y 掺 La 的能带结构图. $\gamma\text{-Si}_3\text{N}_4$ 是直接带隙, Γ 点对应带隙宽度为 3.58 eV . $\gamma\text{-Si}_3\text{N}_4$ 是一类宽带隙的半导体, 而不是大带隙的绝缘体^[3, 4]. $\gamma\text{-Si}_3\text{N}_4$ 价带包括 32 个价带, 它们分成两组, 价带 1—6 为能量较低的一组, 所

占宽度为 5.39 eV , 7—24 为能量较高的一组, 所占宽度为 10.55 eV , 两组价带之间存在 2.97 eV 左右的能隙, 价带顶是非常平坦的^[18]. 掺 Y 后能带结构有了明显的变化, Γ 点对应带隙宽度为 1.62 eV . 价带分成了四组, 价带的数量变密了. 最低价带出现在 -40.2 eV , 而且只有一条能带, 这是由 Y 的 4s 态构成, 最低能带上面出现了两条能带, 又构成一组, 这是由 Y 的 4p 态构成, 能量再高 1.886 eV 处出现的是第 3 组能带, 它的宽度为 5.661 eV , 比未掺杂时宽度略宽, 数量变多, 能量再高 2.516 eV 的是上价带, 它的宽度为 10.988 eV , 数量也明显变多. 导带变密, 导带的底部变平了, 宽度有所展宽, 并向下移动, 直接导致带隙的减小.

从掺 La 能带结构图可以看到, Γ 点对应带隙宽度为 0.76 eV . 它的价带分成三组, 下价带位于 -32.84 eV 处, 也由一条能带构成, 这是由 La 的 5s 态构成; 在能量高于 14.26 eV 出现一组能带, 它的宽度为 5.427 eV , 它是由 La 的 5p 态构成; 上价带宽度为 13.157 eV , 数量上要比未掺杂的密, 上价带之间发生了重叠. 导带宽度展宽, 并进一步向下移, 带隙变得更小. 导带数量也增多, 不及掺 Y 的密, 导带底变得更平. 由图 2 可知, 掺杂后价带项的能带变稀疏, 是由于 Y, La 原子的 5s, 6s 态与周围原子有较强的相互作用, 其态密度变化较为平缓, 显示出很强

图2 γ -Si₃N₄ 和掺 Y 掺 La 能带结构

的非定域性.掺 Y,La 的 4d,5d 态出现在导带中,使得导带进一步向下移,发生了重叠,使带隙变得更小,导带底变得更平.这也可以由下面的分波态密度来进一步解释.

3.3. 态密度分析

图 3 给出了 GGA 计算的 0 压强下掺 Y(a)(见图 3(a))、掺 La(b)(见图 3(b))总态密度、掺 Y 和掺 La 占总态密度及掺杂原子的分波态密度,可以从左到右的峰依次叫第 1,2,3,4 价带和导带.

γ -Si₃N₄^[18]总态密度、N 和 Si 的分波态密度已经被研究了.位于下价带的峰主要来自 N 的 2s 轨道电子,而 Si 的 3s,3p 轨道电子贡献很小;上价带的一系列峰来自于 N 的 2p 轨道电子,N 的 2s 轨道电子贡献很少, Si 的 3s,3p 态有小部分贡献,位于导带的峰主要来自于 Si 的 3s,3p 态,而 N 的 2s,2p 态只有少部分贡献.总的来说,价带顶主要由 N 的 2p 轨道电子贡献,而导带底由 Si 的 3s,3p 轨道电子贡献.

由图 3 可以知道,掺 Y、掺 La 的总分波态密度占总态密度很小的一部分.掺杂和未掺杂结构中 N, Si 的分波态密度贡献给总态密度是一样.掺 Y 时(图 3(a)),第 1(下)价带(V1)和第 2 价带(V2)都是由 Y 提供的,第 3 价带(V3)和第 4(上)价带(V4),Y 提供得非常小,而对导带(C1)来说大小只占 3 eV 左右.Y 的分态密度可以看到:掺 Y 的下价带由 Y 的 4s 轨道上态密度提供,而对其他价带没有贡献;Y 的 5s 轨道电子态密度对第 3,4 价带只有很少的一部分贡献,对导带贡献非常小,几乎没有什么影响.

第 2 价带几乎都由 Y 的 4p 轨道上的态密度所提供,对第 3 价带提供很小一部分,对第 4 价带和导带贡献非常的小;4d 轨道电子对第 1,2 价带没有贡献,对第 3 价带有很小的贡献,对第 4 价带有部分贡献,而它的大部分贡献给了导带.

掺 La 时(如图 3(b)),第 1(下)价带(V1)是由 La 提供的,第 2 价带(V2)和第 3(上)价带(V3)由 La 部分提供,对导带(C1)也有部分的提供.从 La 的分波态密度可以看到:掺 La 的下价带由 La 的 5s 轨道态密度提供,对其他能带几乎不贡献;La 的 6s 轨道态密度对第 2 价带有很小的贡献,对第 3 价带和对导带也只有小部分贡献.La 的 5p 轨道的态密度全部提供给第 2 价带,对其他能带几乎没有贡献;La 的 5d 轨道态密度对第 1,2 价带没有贡献,对第 3 价带有很小的贡献,大部分贡献给了导带.

通过计算可以得出,掺杂稀土元素后价带数要增多,且峰值都要增大.掺杂的原子的价电子对态密度起到不同的作用.钇(Y)、镧(La)的 s,p,d 轨道上的电子对分态密度(PDOS)的峰也有一定的差异.掺 Y 的 4s 轨道电子态密度和掺 La 的 5s 对总态密度贡献是一样的,掺 Y 的 4p 轨道电子态密度和掺 La 的 5p 对总态密度贡献不同,掺 Y 的 4d 轨道电子态密度和掺 La 的 5d 对总态密度贡献略有差异,强度上 La 的 5d 贡献稍大.

3.4. 光学性质分析

在本工作中我们运用 GGA 方法计算了 γ -Si₃N₄, 掺 Y, 掺 La 的吸收系数(图 4)和介电函数(介电函数

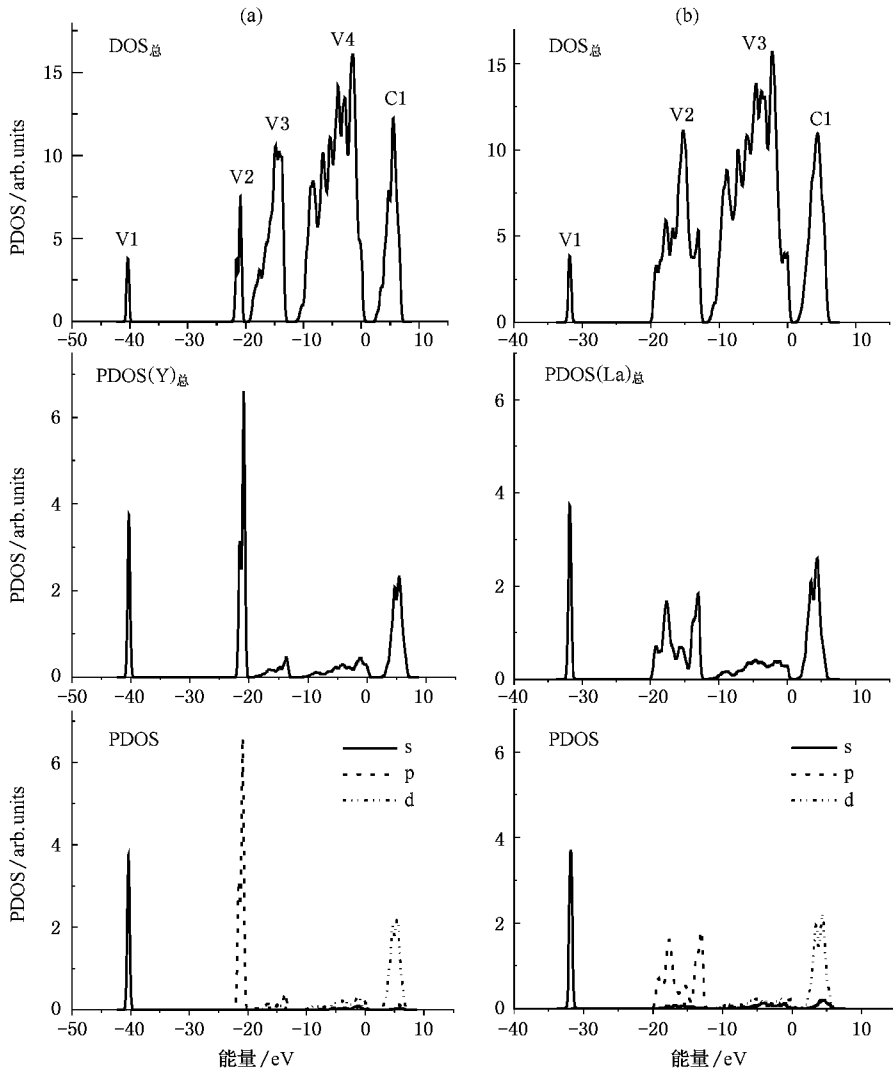


图3 掺 Y(a)掺 La(b)总态密度, 掺 Y, 掺 La 占总态密度及掺杂原子的分波态密度 (a)掺一个钇(Y)的能量(eV)(b)掺一个镧(La)的能量(eV)

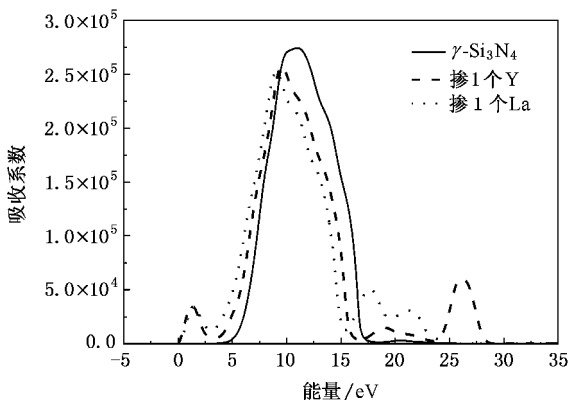


图4 γ -Si₃N₄ 和掺 Y, 掺 La 的吸收系数

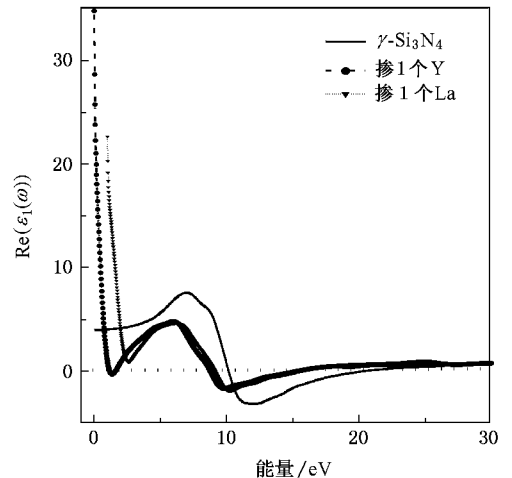


图5 γ -Si₃N₄ 和掺 Y, 掺 La 的介电函数 $\epsilon(\omega)$ 的实部

的实数部分 χ (图 5). 未掺杂的 γ -Si₃N₄^[18] 在 11.303 eV 处只有一吸收峰, 掺 Y, 掺 La 的吸收系数将减小

并且它的主峰左边出现 1 个峰, 右边出现了 2 个峰, 这 3 个峰的峰值大小都比较的低, 主峰向低能方向即长波方向移动. 掺杂 Y, La 时它的主吸收峰左边都出现 1 个位置和大小几乎相同的峰, 它是由掺杂 Y, La 的 d-d 轨道跃迁而形成的, 说明 Y, La 的 d-d 轨道电子的跃迁作用是相同的. 掺杂 Y 时它的主峰右边出现两个新峰, 最远的峰的强度要大些, 接近主峰的峰强度要小些, 两个峰的位置大约在 19 eV, 26 eV 左右, 这是由掺杂 Y 后 5p⁶ 电子跃迁到导带底形成的. 同理, 在掺 La 时, 它的主峰右边的也出现两个更靠近主峰的新峰, 两个峰的位置大约在 17.6 eV, 21.5 eV 左右, 这也是由掺杂 La 后 5p⁶ 电子跃迁到导带底形成的. 从前面的态密度(图 3)可以得到, 在掺杂的情况下, La 的 5p 电子跃迁要比 Y 的 4p 电子跃迁到导带更容易些, 所需能量就略低, 所以掺 La 比掺 Y 在主峰右边出现的吸收峰要靠近主峰一些. 此时由于电子跃迁需要很高的能量, 主吸收峰右边出现的两个小的吸收峰往往在实验上一般观察不到. 从图 5 中可以得出 γ -Si₃N₄ 的静态介电常数 $\epsilon(0)$ 为 4.1, 掺 Y 后 $\epsilon(0)$ 为 35, 掺 La 后 $\epsilon(0)$ 为

22.5. 可见, 掺杂后物质的静态介电常数 $\epsilon(0)$ 变为原来的好几倍. 计算得到的结果预示着掺杂稀土元素后得到高的静态介电常数的物质. 如果在实验中能够合成出这些物质, 将对运用方面起到一定的作用. 高的静态介电常数 $\epsilon(0)$ 意味着该物质有大的折射系数和高的电密度^[5]. 由上面结果看出, 掺 Y, 掺 La 的新物质可作为好的折射材料, 这对于一定的光学元件有潜在的应用前景.

4. 结 语

本文基于密度泛函理论的第一性原理 GGA 方法计算了未掺杂和掺杂稀土元素钇(Y)、镧(La)的 γ -Si₃N₄ 中 N—Y(La) 键的布居值和键长、能带结构和态密度. 掺杂后的带隙要减小, 并且可能形成新的半导体, 这为找到新的半导体提供一个方向, 特别是掺 Y 后的物质的带隙为 1.62 eV, 适合作为太阳能电池的接受层. 还进一步研究了掺杂物质的光学性质, 可以得到更高的静态介电常数, 掺杂后物质可能成为新的介电材料和好的折射材料.

- [1] Dufour G, Rochet F, Roulet H, Sirotti F 1994 *Surf. Sci.* **304** 33
 [2] Zerr A, Mische G, Serghiou G *et al* 1999 *Nature (London)* **400** 340
 [3] Kroll P, von A J 2001 *Phys. Sol. Stat (B)* **226** R6
 [4] Ching W Y, Mo S D, Tanaka I *et al* 2001 *Phys. Rev. B* **63** 064102
 [5] Shang D M, Li Z O Y, Ching W Y *et al* 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 5046
 [6] Oba F, Tatsumi K, Adachi H, Tanaka I 2001 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1577
 [7] Oba F, Tatsumi K, Tanaka I, Adachi H 2002 *J. Am. Ceram. Soc.* **85** 97
 [8] Ching W Y, Mo S D, Ouyang L Z, Tanaka I *et al* 2000 *Phys. Rev. B* **61** 10611
 [9] Ziegler A, Idrobo J C, Cimbulk M K, Kisielowski C *et al* 2004 *Science* **306** 1768
 [10] Pan H Z, Xu M, Zhu W J, Zhou H P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3585

- (in Chinese)[潘洪哲、徐明、祝文军、周海平 2006 物理学报 **55** 3585]
 [11] Tan M Q, Tao X M, Xu X J 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 463 (in Chinese)[谭明秋、陶向明、徐小军 2003 物理学报 **52** 463]
 [12] Jiang Z Y, Xu X H, Wu H S *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1586 (in Chinese)[姜振益、许小红、武海顺等 2002 物理学报 **51** 1586]
 [13] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
 [14] Car R, Parrinello M 1985 *Phys. Rev. Lett.* **55** 2471
 [15] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
 [16] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
 [17] Fischer T H, Almlof J 1992 *J. Phys. Chem.* **96** 9768
 [18] Ding Y C, Xu M, Pan H Z, Shen Y B, Zhu W J, He H L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 117 (in Chinese)[丁迎春、徐明、潘洪哲、沈益斌、祝文军、贺红亮 2007 物理学报 **56** 117]

Electrical structures and optical properties of doped earth element (Y , La) in γ -Si₃N₄

Ding Ying-Chun^{1)†} Xiang An-Ping¹⁾ Xu Ming²⁾¹⁾ Zhu Wen-Jun²⁾³⁾

¹⁾ *Department of Optoelectronics ,Chengdu University of Information Technology ,Chengdu 610225 ,China)*

²⁾ *Institute of Solid State Physics & School of Physics and Electronic Engineering ,Sichuan Normal University ,Chengdu 610068 ,China)*

³⁾ *Key Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research ,Institute of Fluid Physics ,
China Academy of Engineering Physics ,Mianyang 621900 ,China)*

(Received 18 January 2007 ; revised manuscript received 8 February 2007)

Abstract

The electronic structures and optical properties , the atomic population , bond lengths , band structures and density of states (DOS) of undoped and doped rare earth elements (Y , La) in γ -Si₃N₄ have been calculated by means of plane wave pseudo-potential method (PWP) with generalized gradient approximation (GGA). The gap after doping will decrease and enables the formation of new semiconductor , which affords to help finding new semiconductor . We researched optical properties after doping of rare earth elements (Y , La) , and found that the static dielectric constant of doped γ -Si₃N₄ is much higher than that of the undoped material , which may serve as new dielectric and refractive material , and may have special applications in certain optical devices .

Keywords : γ -Si₃N₄ , doping , electrical structure , optical property

PACC : 7155 , 7115H , 6170T

† E-mail : dyccqzx@yahoo.com.cn