

硅基外延 OsSi₂ 电子结构及光电特性研究*

余志强^{1)2)†}

1) (湖北民族学院电气工程系, 恩施 445000)

2) (贵州大学新型光电子材料与技术研究所, 贵阳 550025)

(2012 年 4 月 13 日收到; 2012 年 5 月 22 日收到修改稿)

基于第一性原理密度泛函理论的赝势平面波方法, 对 Si(111) 基外延稳定正交相 OsSi₂ 的能带结构、态密度以及光电特性进行了研究。研究结果表明, Si(111) 基外延稳定正交相的 OsSi₂ 是一种间接带隙半导体, 禁带宽度为 0.625 eV; 其价带主要是由硅的 3s, 3p 态电子和锇的 5d 态电子构成, 导带主要由锇的 5d 态电子与硅的 3s, 3p 态电子构成; 其静态介电函数为 15.065, 折射率为 3.85, 吸收系数最大峰值为 $3.9665 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ 。利用理论计算的能带结构和态密度研究了 Si(111) 基外延稳定正交相 OsSi₂ 的介电函数、折射率、吸收系数、光电导率和能量损失函数的变化规律, 为 Si(111) 基外延 OsSi₂ 的应用提供了理论基础。

关键词: 第一性原理, OsSi₂, 电子结构, 光电特性

PACS: 71.20.-b, 78.20.Ci

1 引言

半导体材料是现代电子工业发展的基础, 构成这些半导体材料的元素大部分由III-V 族或II-VI 族元素组成, 而这些半导体材料的组成元素对人体一般都具有毒性。自 20 世纪 90 年代以来, 英国、德国、日本等国的科学家们相继研究并发现了一类由地壳中含量丰富、安全、对环境负荷小、能循环使用的硅化物半导体材料, 被称为环境友好半导体材料^[1]。OsSi₂ 是一种很有发展潜力的环境友好半导体材料, 它具有高的热容量和相当好的晶体性质, 并且可以在硅基片上外延生长, 同时与传统的硅工艺兼容, 因此在光电子器件、能量器件领域都具有重要的应用前景。

对于半导体材料, 决定其光电特性的本质主要是材料的电子结构。因此近年来, 对 OsSi₂ 能带结构的计算已经成为材料研究领域的热点。1996 年 Van 等^[2] 采用 Muffic-Tin 球轨道法得到 OsSi₂ 的带隙

值为 0.06 eV; 1997 年 Filonov 等^[3] 通过 Muffic-Tin 球轨道法计算得出 OsSi₂ 的带隙值为 0.95 eV; 2001 年 Migas 等^[4] 采用全电势线性化缀加平面波法研究了 OsSi₂ 的基态能带结构、态密度和部分光学性质; 2011 年 Tani 等^[5] 通过第一性原理密度泛函理论研究了在高压下 OsSi₂ 的晶体结构和弹性特性。而在实验研究方面, 仅有的报道是 1989 年 Chang 和 Chou^[6] 在氢气和氩气的混合气体中第一次成功地在 Si(111) 衬底上外延生长出了正交结构的外延 OsSi₂ 薄膜; 2006 年 Cottier 等^[7] 采用分子束外延法在 Si(100) 衬底上外延生长得到了 OsSi₂ 薄膜。

目前, 对 OsSi₂ 的研究主要集中在对其进行实验制备以及采用不同的理论模型对其进行理论计算方面的研究, 而对于硅基外延生长 OsSi₂ 的光电特性与外延关系的理论研究尚未开展。本文采用基于第一性原理密度泛函理论的赝势平面波方法, 对 Si(111) 基外延稳定正交相 OsSi₂ 的能带结构、态密度以及光电特性进行了理论研究, 研究结果为 Si(111) 基外延 OsSi₂ 的工业应用提供了理

* 国家自然科学基金(批准号: 60766002) 和湖北省教育厅科学技术研究项目(批准号: B20122903) 资助的课题。

† E-mail: y_zq2008@yahoo.cn

论基础.

2 理论模型及计算方法

2.1 理论模型

环境友好半导体硅化物 OsSi_2 具有正交相晶体结构, 其空间点群为 $Cmca$, 晶格常数^[8] 为 $a = 1.014 \text{ nm}$, $b = 0.811 \text{ nm}$, $c = 0.822 \text{ nm}$, 晶面角 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. 如图 1 所示, OsSi_2 晶体的每个晶胞由 24 个原子构成, 其中包含 8 个锇原子, 16 个硅原子.

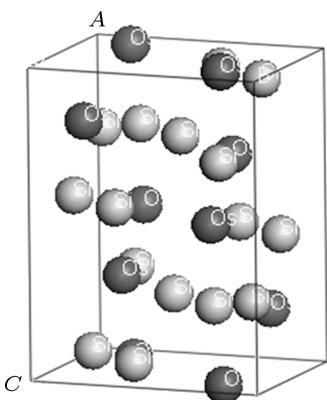


图 1 正交相 OsSi_2 的晶胞结构示意图

2.2 计算方法

本文基于 Material Studio 4.0 中的 CASTEP 软件^[9] (Cambridge sequential total energy package) 对 $\text{Si}(111)$ 基外延 OsSi_2 的能带结构、态密度以及光电特性进行理论计算. CASTEP 软件是一个基于密度泛函理论^[10] 的从头算量子力学程序, CASTEP 软件利用总能量平面波赝势方法将材料的离子势用赝势来代替, 而将材料的电子波函数通过平面波基组进行展开, 将电子与电子之间的相互作用通过广义梯度近似 (GGA)^[11] 或者局部密度近似 (LDA)^[12,13] 进行理论校正. CASTEP 软件是目前材料研究领域应用最为广泛的理论研究方法之一.

本文理论计算所采用的 OsSi_2 晶格常数都为实验值. 首先采用 BFGS 算法^[14–17] 对 $\text{Si}(111)$ 基外延 OsSi_2 的晶体模型进行结构优化, 将 OsSi_2 晶胞中的价电子波函数通过平面波基矢进行展开, 同时

设置 OsSi_2 晶体的平面波截断能量值为 380 eV, 迭代过程中的收敛精度值为 $5 \times 10^{-7} \text{ eV}$. 采用 GGA 来优化 OsSi_2 离子的相互作用部分, OsSi_2 离子的相互作用势通过超软赝势^[18] 代替, 利用 $4 \times 3 \times 3$ 的 Monkhorst-Pack 形式^[19] 高对称特殊 K 点理论来处理 OsSi_2 的布里渊区积分, 其中 OsSi_2 的能量计算都在倒易空间中进行.

2.3 光电特性的理论描述

对于半导体材料, 决定材料光电特性的本质主要是材料的电子结构. 材料的电子结构主要由材料本身的介电函数、折射率、吸收系数、光电导率等表征, 而这些光学常数都是由半导体材料费米面附近的能带结构、载流子浓度以及载流子迁移率等决定的. 因此研究半导体光电材料的电子结构成为一种必然的趋势.

对于固态半导体材料, 在线性响应范围内, 材料的宏观光学响应函数通常可以由光的复介电函数 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ 或者复折射率 $N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$ 来表征, 其中

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2, \quad (1)$$

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

对于半导体材料的电子结构, 无论是带内跃迁频率还是带间跃迁频率, 它们的值都远大于声子频率, 因此对于半导体材料的电子结构可以忽略声子的参与, 而仅考虑半导体材料电子的激发跃迁情况. 根据量子力学的观点, 半导体材料的带间跃迁对光子的吸收过程是电子从低能态跃迁到高能态的过程. 根据跃迁几率的定义可以得到半导体材料的介电常数虚部为

$$\begin{aligned} \varepsilon_2(\omega) = & \frac{\pi}{\varepsilon_0} \left(\frac{e}{m\omega} \right)^2 \sum_{V,C} \left\{ \int_{BZ} \frac{2dK}{(2\pi)^3} \right. \\ & \times |a \cdot M_{CV}(K)|^2 \times \delta [E_C(K) \right. \\ & \left. \left. - E_V(K) - \hbar\omega \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3)$$

其中 C 和 V 分别表示半导体材料的导带与价带, K 表示倒易格矢, $|a \cdot M_{CV}(K)|^2$ 为跃迁电子的动量跃迁矩阵元, $E_C(K)$ 和 $E_V(K)$ 分别表示导带和价带上的本征能级, w 为角频率. (3) 式表明, 半导体材料的宏观光学常数与其微观能带结构、跃迁矩阵元以及态密度相联系. 因此, 通过半导体材料的各个

宏观光学常数就可以反映半导体材料的能带电子结构,进而反映半导体材料的光电特性.

3 计算结果和讨论

3.1 OsSi₂ 的体系优化

根据正交相 OsSi₂ 在 Si(111) 面上存在的异质结外延关系 OsSi₂(101)//Si(111), 将 Si(111) 基外延正交相 OsSi₂ 的晶格常数 b, c 约束于硅基晶格常数, 在 OsSi₂ 实验晶格常数值 [8,22] 附近对晶胞体积和总能量进行优化计算. 晶胞总能量最小时所对应的晶格常数即为构成晶胞最稳定的晶格常数, 由此得到 Si(111) 基外延稳定平衡体系下 OsSi₂ 的晶格常数.

采用 BFGS 算法对 Si(111) 基外延稳定正交相的 OsSi₂ 晶胞中的原子位置进行优化处理, 使体系达到最稳定的状态. 经过优化计算得到 Si(111) 基外延稳定正交相的 OsSi₂ 外延关系为 OsSi₂(101) //Si(111), 取向关系为 OsSi₂[010] //Si[011], Si(111) 基外延稳定正交相 OsSi₂ 的晶格常数 a 与晶胞总能量关系曲线如图 2 所示, OsSi₂ 在稳定状态下的晶格常数如表 1 所示. 根据图 2 的 OsSi₂ 晶格常数 a 与晶胞总能量的关系曲线, 当晶格常数选取范围从 1.005 nm 至 1.030 nm 时, 只有当晶格常数为 1.020 nm 时, 晶胞的总能量才处于最低点, 此时 Si(111) 基外延正交相的 OsSi₂ 达到最稳定平衡状态.

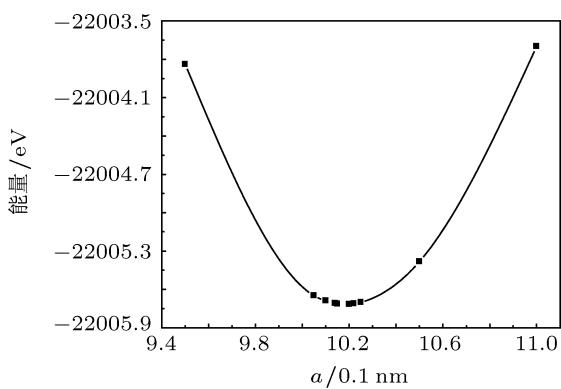


图 2 Si(111) 基外延正交相 OsSi₂ 的晶格常数 a 与晶胞总能量关系曲线

表 1 为 Si(111) 基外延正交相的 OsSi₂ 经过理论优化后所得到的 OsSi₂ 晶格常数, 其中带有 * 号

的表示 OsSi₂ 受硅基约束而选取的晶格常数值. 根据表 1 所示, 通过几何优化后所得到的 Si(111) 基外延正交相 OsSi₂ 的理论晶格常数与实验晶格常数非常接近, 误差范围为 0.59%—5.6%.

表 1 Si(111) 基外延正交相 OsSi₂ 的晶格常数

晶格常数	实验值 [8,22]	计算值	误差/%
a/nm	1.014	1.020	0.59
b/nm	0.811	0.768*	5.60
c/nm	0.822	0.827*	0.60

3.2 OsSi₂ 的能带结构及态密度

在结构优化的基础上, 利用超软赝势处理 OsSi₂ 离子实与价电子之间的相互作用, 通过理论计算得到了 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 沿布里渊区高对称点方向的能带结构. 图 3 为 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 费米面附近的能带结构. 由图 3 与表 2 可知, 在 Si(111) 基外延稳定态的 OsSi₂ 是一种间接带隙半导体, 外延 OsSi₂ 的能带在价带的 G 点与 Z 点之间取得最大值 0 eV, 在导带的 Y 点取得最小值 0.625 eV, 其禁带宽度为 0.625 eV, 这与文献 [6] 中所提到的 $\text{Fe}_{1-x}\text{Os}_x\text{Si}_2$ 的间接带隙值范围 0.73—0.95 eV 比较接近. 通过与块体 [20] 正交相的 OsSi₂ 相比, Si(111) 基外延稳定状态下 OsSi₂ 的带隙宽度有所变窄. 产生这种现象的原因可能是由于 OsSi₂ 晶体在 Si(111) 基外延生长过程中产生的晶格失配引起的, 而 Si(111) 基外延 OsSi₂/Si 界面的晶格形变引起了能带畸变使 OsSi₂ 的间接带隙宽度变窄.

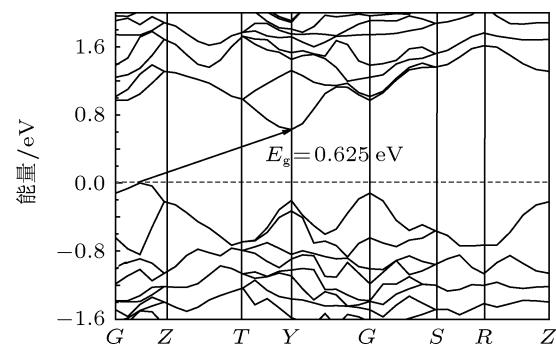


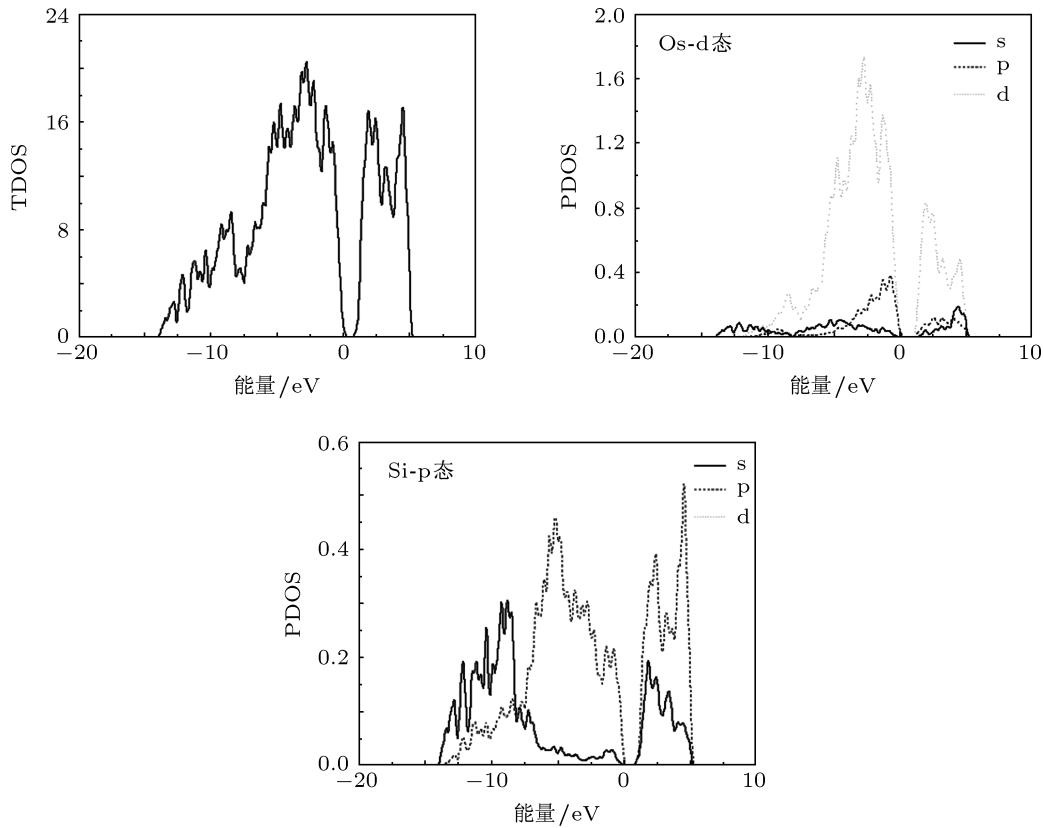
图 3 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的能带结构

表 2 第一布里渊区的高对称 K 点在价带顶 E_V 和导带底 E_C 的特征能量值(单位: eV)

	G	Z	T	Y	G	S	R	Z
E_V	-0.115	-0.218	-0.685	-0.214	-0.126	-0.558	-0.751	-0.218
E_C	0.932	1.310	1.023	0.625	1.054	1.416	1.653	1.315

图 4 为 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的总态密度(TDOS) 及分态密度(PDOS) 图。根据图 4, 在较小的电子能量范围(-15—0.5 eV), OsSi₂ 的态密度主要由硅的 3s, 3p 态电子和锇的 5d 态电子构成;而在较大的电子能量范围(0.5—5 eV), OsSi₂ 的态密度主要由锇的 5d 态电子和硅的 3s, 3p 态电子构成。根据图 4 中 OsSi₂ 的态密度变化规律, OsSi₂ 的价带主要由锇的 5d 态电子和硅的 3s, 3p 态电子构成,

OsSi₂ 的导带主要由硅的 3s, 3p 与锇的 5d 态电子构成。将 Si(111) 基外延稳定状态 OsSi₂ 的性质与过渡金属硅化物相比较, 过渡金属硅化物费米面附近的价带主要由硅的 p 态电子和过渡金属的 d 态电子之间的强烈杂化构成, 导带则主要由硅的 p 态电子的反键和过渡金属的 d 态电子的反键混合构成^[21], 因此 Si(111) 基外延稳定状态 OsSi₂ 的载流子迁移率要比过渡金属硅化物的迁移率大。

图 4 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的总态密度及分态密度

3.3 光电特性

3.3.1 OsSi₂ 的复介电函数与吸收谱

半导体材料的介电函数反映了材料的能带结构及其各种光学信息。Si(111) 基外延稳定状态 OsSi₂ 作为半导体材料, 其光谱是由能带间的

电子跃迁所产生的, 半导体 OsSi₂ 的各介电峰值的变化规律可以通过 Si(111) 基外延 OsSi₂ 的能带结构和态密度解释。图 5 是 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的介电函数实部 ϵ_1 和虚部 ϵ_2 的变化曲线。根据图 5 可以得到 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的静态介电函数 $\epsilon_1(0) = 15.065$, 与块体 OsSi₂ 的

静态介电函数^[20]相比有所减小。Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的介电函数虚部 ε_2 在能量 3.755 eV 处达到第一峰值, 介电函数虚部 ε_2 的第一峰值主要是由最高价带与最低导带之间的电子跃迁所产生。在 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的介电函数虚部 ε_2 在能量低于 0.866 eV 和高于 18.528 eV 的区域为 0。根据图 5 的 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的介电函数实部 ε_1 和虚部 ε_2 的变化规律, Si(111) 基外延平衡态附近 OsSi₂ 的介电函数实部和虚部变化趋于一致, OsSi₂ 处于外延平衡态时的介电函数曲线相对往低能区漂移, 从而出现 OsSi₂ 的介电峰值减少且介电峰强度明显增强。

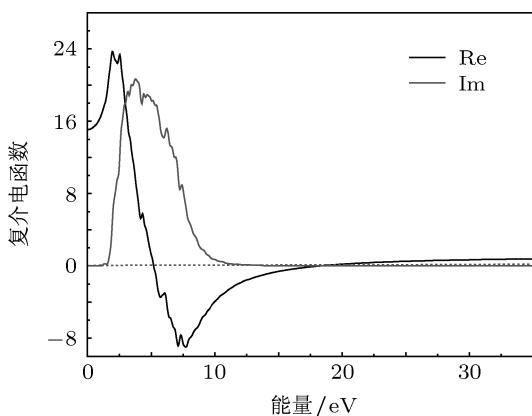


图 5 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的复介电函数

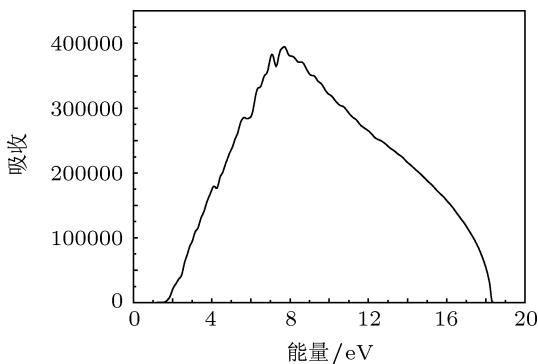


图 6 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的吸收谱

对于半导体介质而言, 其吸收系数表征的是光波在半导体介质中单位传播距离光强度衰减的百分比, 根据半导体介电函数和吸收系数之间的关系

$$\alpha = \frac{\omega}{nc} \varepsilon_2, \quad (4)$$

我们可以得到 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的吸收谱图 6。由图 6 可知, 对于 Si(111) 基外延稳定态的

OsSi₂ 半导体介质, 在入射光子能量低于 1.640 eV 和高于 18.308 eV 的区域范围内, Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 对光的吸收为 0, 表明在入射光子波长大于 756 nm 和波长小于 67 nm 的区域范围内是透明的。在入射光子能量高于 1.640 eV 和低于 18.308 eV 的区域范围内, 随着入射光子能量的增加, Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的吸收系数先增大后减小, 在入射光子能量为 7.650 eV 时其吸收系数达到最大峰值 $3.9665 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$, 与块体结构 OsSi₂ 的吸收系数最大峰值相比, Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的吸收系数最大峰值比块体结构^[22]OsSi₂ 的吸收系数最大峰值大, 表明 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 具有更强的光电转换特性。

3.3.2 OsSi₂ 的复折射率与反射谱

根据半导体材料的复折射率和介电函数关系(1)和(2)式, 得到 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的复折射率曲线图 7。由图 7 可知, Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的折射率 $n_0 = 3.85$, n 的主要峰值出现在 1.250—1.952 eV 的区域范围内, 折射率最大峰值处对应的入射光子能量值为 1.952 eV, 当入射光子的能量高于 1.952 eV 后折射率随着光子能量的增加而逐渐减小。由图 5 可知, 在能量处于 5.062—18.865 eV 的范围内, Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的介电函数实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 小于 0。根据波矢方程, 实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 小于 0 表征入射光波矢 k 为虚数, 这表明在此频域内入射光不能在 OsSi₂ 半导体介质中传播。根据外延稳定态 OsSi₂ 的复折射率公式(1)可知, 在这一频域 $k(\omega)$ 大于 $n(\omega)$, 此时反射率较大, 表明此时 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 呈现出金属的反射特性。

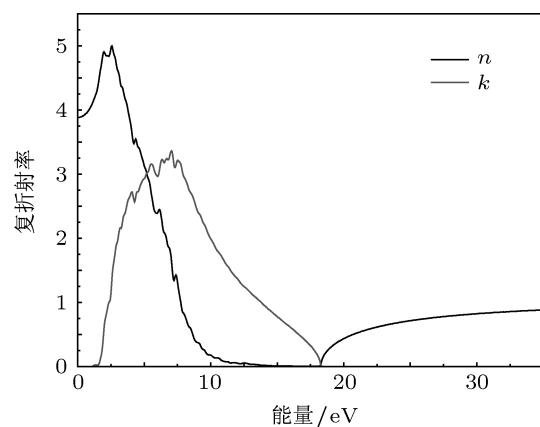


图 7 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的复折射率

对于 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂, 根据 (2) 和 (4) 式, 可以得到外延稳定态 OsSi₂ 的吸收系数与消光系数之间的关系

$$\alpha = \frac{4\pi}{\lambda} k, \quad (5)$$

其中 λ 为光波在真空中的波长, 与吸收系数相对应, Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的消光系数在入射光子能量低于 0.875 eV 和能量大于 18.772 eV 的区域范围内为 0, k 的主要峰值出现在入射光子能量为 4.543—8.569 eV 的范围内, 能量大于 8.569 eV 后消光系数随着入射光子能量的增加而逐渐减小, 在入射光子能量达到 18.772 eV 时消光系数 k 减小到 0. 当入射光子能量大于 18.772 eV 时, 半导体 OsSi₂ 吸收的光学量都趋于 0, 其折射率随光子频率的变化为正常色散, Si(111) 基外延稳定态的 OsSi₂ 再次转变为透明状态, 同时 OsSi₂ 的消光系数在带边表现出强烈的吸收特征. 与块体结构^[20]OsSi₂ 的复折射率相比, Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的折射率比块体结构 OsSi₂ 的折射率小.

对于 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 半导体介质, 当入射光由空气直接垂直入射到具有复折射率的 OsSi₂ 半导体介质中, 可得到 OsSi₂ 半导体介质的反射系数与复折射率之间的关系

$$R(\omega) = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2}. \quad (6)$$

图 8 为 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的反射谱. 由图 8 可知, Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的反射谱的带间跃迁主要发生在 7.825—18.362 eV 的入射光子能量区域内, 当入射光子能量达到 17.851 eV 时, Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的反射率趋近于 1. 这是由于在这一区域内 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 呈现出金属的反射特性, 入射光波大部分都被反射, 对应 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的折射率 n 趋于 0, 表明硅的 3s, 3p 态电子与锇的 5d 态电子具有很深的能级, 这与采用第一性原理理论计算所得到的 OsSi₂ 能带结构和态密度是一致的. 根据理论计算的结果, Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的价带电子密度分布不均匀, 这主要是由于硅的 3s, 3p 态电子和锇的 5d 态电子贡献的价带态密度均表现出强烈的局域化特征, 从而影响 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的电子结构和光电特性.

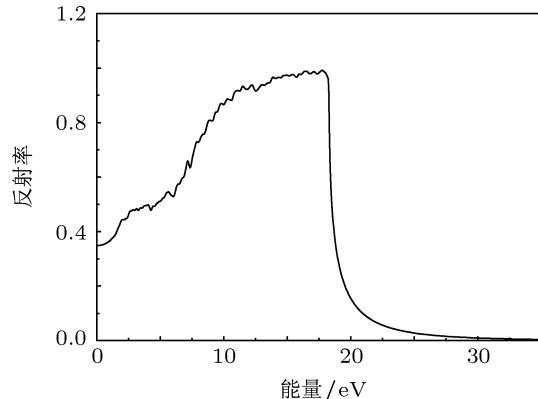


图 8 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的反射谱

3.3.3 OsSi₂ 的光电导率与损失函数

半导体材料的光电导是由光照半导体所引起的半导体电导率改变的现象. 图 9 是 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的复光电导率曲线. 由图 9 可知, Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的光电导率的实部在入射光子能量低于 0.868 eV 和能量高于 18.720 eV 的区域范围内为 0, 其主要峰值出现在 5.125—9.312 eV 的入射光子能量范围内, 这些都与 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的吸收系数和消光系数峰值所出现的位置相对应.

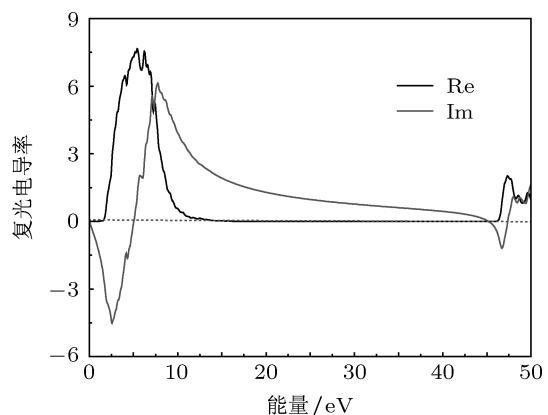


图 9 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 的复光电导率

根据 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 半导体的介电常数, 可以得到 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 半导体的电子能量损失函数. OsSi₂ 半导体的电子能量损失函数可表示为

$$L(\omega) = \text{Im}\left(\frac{-1}{\varepsilon(\omega)}\right) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{[\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)]}. \quad (7)$$

对于 Si(111) 基外延稳定态 OsSi₂ 半导体, 其能量损失函数的峰值代表与 OsSi₂ 离子体系振荡相关联的特性. 图 10 为 Si(111) 基外延稳定态

OsSi_2 的电子能量损失函数曲线图。根据图 10 电子能量损失函数曲线的变化规律, $\text{Si}(111)$ 基外延稳定态 OsSi_2 的最大电子能量损失峰值出现在 18.315 eV 处, 在入射光子能量低于 0.852 eV 时 $\text{Si}(111)$ 基外延稳定态 OsSi_2 的电子能量损失为 0。与块体结构 OsSi_2 的电子能量损失函数相比, $\text{Si}(111)$ 基外延稳定态 OsSi_2 的电子能量损失函数所能达到的最大值较高。

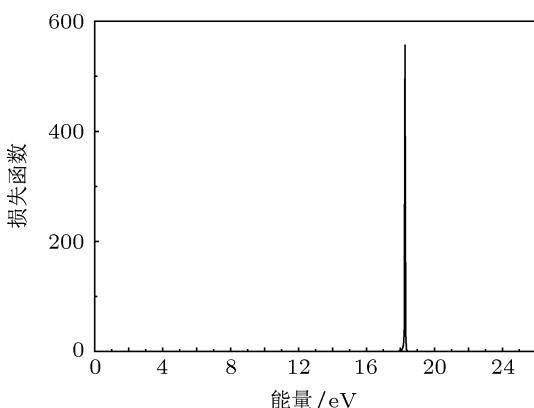


图 10 $\text{Si}(111)$ 基外延稳定态 OsSi_2 的损失函数

4 结 论

基于第一性原理密度泛函理论的赝势平面波方法, 对 $\text{Si}(111)$ 基外延稳定正交相 OsSi_2 的能带结构、态密度和光电特性进行了理论研究。研究结果表明:

- 1) $\text{Si}(111)$ 基外延稳定正交相的 OsSi_2 是一种间接带隙半导体, 禁带宽度为 0.625 eV, 其价带主要是由硅的 3s, 3p 态电子和锇的 5d 态电子构成, 导带主要由锇的 5d 态电子与硅的 3s, 3p 态电子构成;
- 2) $\text{Si}(111)$ 基外延稳定正交相 OsSi_2 的静态介电函数为 15.065, 折射率为 3.85, 吸收系数最大峰值为 $3.9665 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$;
- 3) $\text{Si}(111)$ 基外延稳定正交相的 OsSi_2 与块体结构的 OsSi_2 相比, 其禁带宽度比块体结构的要窄, 静态介电函数和折射率有所减小, 吸收系数最大峰值有所增强, 表明 $\text{Si}(111)$ 基外延稳定正交相的 OsSi_2 具有更强的光电转换特性。

- [1] Miyake K, Makita Y, Maeda Y, Suemasu T 2001 *Thin Solid Films* **381** Vii
- [2] Van E J, Turchi P E A, Sterne P A 1996 *Phys. Rev. B* **54** 7897
- [3] Filonov A B, Migas D B, Shaposhnikov V L, Dorozhkin N N, Borisenko V E, Lange H 1997 *Appl. Phys. Lett.* **70** 976
- [4] Migas D B, Miglio L, Henrion W, Rebien M, Marabelli F, Cook B A, Shaposhnikov V L, Borisenko V E 2001 *Phys. Rev. B* **64** 075208
- [5] Tani J I, Takahashi M, Kido H 2011 *Comput. Mater. Sci.* **50** 2009
- [6] Chang Y S, Chou M L 1989 *J. Appl. Phys.* **66** 3011
- [7] Cottier R J, Amir F Z, Zhao W, Hossain K, Gorman B P, Golding T D, Anibou N, Donner W 2006 *J. Vacuum Sci. Technol. B* **24** 1488
- [8] Engstrom I 1970 *Acta Chem. Scand.* **24** 2117
- [9] Segall M D, Philip Lindan J D, Probert M J, Pickard C J, Hasnip P J, Clark S J, Payne M C 2002 *J. Phys. Rev. Condens. Matter.* **14** 2717
- [10] Hohenberg P, Kohn W 1964 *Phys. Rev. B* **136** B864
- [11] Perdew J P, Wang Y 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13244
- [12] Ceperley D M, Alder B J 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 566
- [13] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev.* **140** A1133
- [14] Broyden C G 1970 *J. Inst. Math. Appl.* **6** 222
- [15] Fletcher R 1970 *Comput. J.* **13** 317
- [16] Goldfarb D 1970 *Math. Comput.* **24** 23
- [17] Shanno D F 1970 *Math. Comput.* **24** 647
- [18] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [19] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [20] Li X Z, Xie Q, Chen Q, Zhang 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]
- [21] Kishino S, Imai T, Iida T, Nakaishi Y, Shinada M, Takanashi Y, Hamada N 2007 *J. Alloy Compd.* **428** 22
- [22] Schellenberg L, Braun H F, Muller J 1988 *J. Less-Common Met.* **144** 341

Electronic structure and photoelectric properties of OsSi₂ epitaxially grown on a Si(111) substrate*

Yu Zhi-Qiang^{1)2)†}

1) (*Department of Electrical Engineering, Hubei University for Nationalities, Enshi 445000, China*)

2) (*Institute of Advanced Optoelectronic Materials and Technology, Guizhou University, Guiyang 550025, China*)

(Received 13 April 2012; revised manuscript received 22 May 2012)

Abstract

The electronic structure and photoelectric properties of semiconductor material OsSi₂ epitaxially grown on a Si(111) substrate are investigated using the pseudo potential plane wave method based on first principles method. The calculated results show that OsSi₂ is an indirect semiconductor material with a band gap of 0.625 eV. The valence band of OsSi₂ epitaxially grown on a Si(111) substrate is composed mainly of Si 3s, 3p and Os 5d, and the conduction band is comprised mainly of Os 5d as well as Si 3s, 3p. The static dielectric function is 15.065, the reflectivity is 3.85, and the biggest peak of the absorption coefficient is $3.9665 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. Furthermore, the static dielectric function, refractivity index, reflectivity, absorption, conductivity and loss function of OsSi₂ epitaxially grown on a Si(111) substrate are analyzed in terms of the calculated band structure and density of states. The results offer theoretical data for the design and application of OsSi₂.

Keywords: first principles methods, OsSi₂, electronic structure, photoelectric properties

PACS: 71.20.-b, 78.20.Ci

* Projected supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60766002) and the Scientific Research Foundation of the Education Department of Hubei Province, China (Grant No. B20122903).

† E-mail: y_zq2008@yahoo.cn