

(111)应变对立方相 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 能带结构及光学性质的影响

岑伟富 杨吟野* 范梦慧 姚娟 杨文帮 黄金保

贵州民族大学理学院, 贵州 贵阳 550025

摘要 采用第一性原理赝势平面波方法对(111)应变下立方相 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的能带结构及光学性质进行模拟计算, 全面分析了应变对其能带结构、光学性质的影响。计算结果表明: 在-8%~0%压应变范围内, 随着应变的逐渐增大导带向低能方向移动, 价带向高能方向移动, 带隙逐渐减小, 但始终为直接带隙; 在0%~2%张应变范围内, 随着应变的增加, 带隙逐渐增大, 应变为2%时直接带隙达到最大 $E_g=0.60441$ eV; 当张应变为4%时, $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 变为间接带隙半导体。 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的介电常数和折射率随着张应变的增加而增加; 施加-2%~0%压应变时, 介电常数和折射率逐渐减小, 到达-2%时达到最小值, 此后随着压应变的增加介电常数和折射率逐渐增大。施加压应变时吸收谱和反射谱随着应变的增大而减小, 施加张应变时吸收谱和反射谱随着应变的增大而增大。应变可以改变立方相 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的电子结构和光学常数, 是调节其光电传输性能的有效手段。

关键词 材料; 应变; 光学性质; 能带结构; 第一性原理; $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$

中图分类号 O472+3 文献标识码 A doi: 10.3788/LOP51.091603

Effect of Strain on (111) Surface on Energy Band Structure and Optical properties of Cubic $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$

Cen Weifu Yang Yinye Fan Menghui Yao Juan Yang Wenbang Huang Jinbao

School of Science, Guizhou Minzu University, Guiyang, Guizhou 550025, China

Abstract Energy band structure and optical properties of the cubic $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ with strain on the (111) surface are calculated by the First Principle pseudo-potential method based on the density functional theory (DFT), and the effect of strain on energy band structure and optical properties is analyzed. The results show that under the compressive strain range of -8%~0%, it is direct semiconductor but the band gap decreases with the increase of strain, the conduction band moves to low energy while the valence band moves to high energy; when the tensile strain is 0%~2%, the band gap increases with the increase of strain, when the tensile strain is 2%, the direct band gap is maximum, $E_g=0.60441$ eV; when the tensile strain is 4%, it turns to indirect semiconductor. The dielectric constant and the refractive index of cubic $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ increase with the tensile strain; when the compressive strain is -2%~0%, the dielectric function and the refractive index decrease; when the compressive strain reaches -2%, the dielectric function and the refractive index are minimum, then they increase with growth of the compressive strain. The absorption and reflectivity decrease with the increase of compressive strain, while they increase with the increase of tensile strain. The energy band structure and optical properties the cubic $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ are influenced by strain, which is an effective means to adjust photoelectric transmission performance of cubic $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$.

Key words materials; strain; optical properties; energy band structure; First Principle; $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$

OCIS codes 160.6000; 160.4760; 160.5298; 160.2100

收稿日期: 2014-03-12; 收到修改稿日期: 2014-04-11; 网络出版日期: 2014-08-06

基金项目: 国家自然科学基金(51266002)、教育部科学技术研究重点项目(210200)、贵州省科学技术联合基金(LKM201130)、贵州省优秀科技教育人才省长专项资金(2011174)

作者简介: 岑伟富(1988—), 男, 硕士研究生, 主要从事电子功能材料方面的研究。E-mail: cenweifu1988@sina.cn

导师简介: 杨吟野(1969—), 男, 博士, 教授, 主要从事电子功能材料方面的研究。E-mail: Ythin1969@sohu.com

1 引言

碱土金属硅化物 Ca-Si 是一种新型环境友好型半导体材料, Ca 和 Si 反应生成六个中间相, 其中 Ca_2Si 是直接迁移型半导体。 Ca_2Si 具有两种结构, 一种属于正交晶系, 为稳定结构^[1], 禁带宽度为 0.36 eV, 与实验值 1.9 eV 相差较大^[2-3]; 另一种结构属于立方晶系, 在外压力作用下为稳定结构, 禁带宽度为 0.56 eV^[4]。 Ca_2Si 具有优异的光学、电学性质, 同时能在硅基上外延生长, 在制备和使用过程中对环境无污染, 长期使用对生命体无害, 因此在光电子器件、电子器件及热电器件等领域有广泛的应用前景, 是一种潜在的理想半导体材料。 目前, 国内外对其研究投入了大量的人力、财力。 Imai 等^[2,5]利用第一性原理赝势方法计算得出正交相 Ca_2Si 为带隙为 0.36 eV 的直接带隙半导体。 Migas 等^[6]用全电势线性化缀加平面波方法 (FLAPW) 和广义梯度近似方法 (GGA) 对 Ca_2Si 的基态能带、态密度和介电函数进行计算, 得出正交相是一种稳定相。 在实验方面, 基于电阻率的测量实验报道 Ca_2Si 的带隙为 1.90 eV^[6]。 Takagi 等^[7-8]应用蒸发加热处理两步法首次制备了单相的 Ca_2Si 晶体。 杨吟野等^[9-13]利用磁控溅射技术, 在 Si(100) 衬底上沉积 Ca 膜, 然后在真空退火中获得单一相直接迁移型的 Ca-Si 膜^[9-15]。 P 掺杂立方相 Ca_2Si 可使其在失去外力的情况下处于稳定结构, 但 Ca-Si 膜在实际生长过程中受到温度、压强、电激等因素的影响其晶格易发生应变, 影响 Ca-Si 膜的电学性质和光学性质, 到目前为此应变对材料性能影响的理论研究鲜见报道^[14-19], 应变对 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 电子结构及光学性质的影响尚无相关报道。 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 作为新型的半导体材料, 有必要深入研究应变对其电子结构及光学性质的影响, 揭示应变对其光学性质的影响机制。 因此, 本文采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波方法对应变作用下 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的电子结构及光学性质进行了全面的模拟计算和分析。

2 计算方法

立方晶系 Ca_2Si 空间群为 $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$, 晶格常数为 $a=0.7148$ nm, 每个原胞有 12 个原子, 其中 8 个 Ca 原子, 4 个 Si 原子^[1]。 在外压稳定下 Ca_2Si 的晶格常数 $a=0.4702$ nm, 在外压稳定下采用一个 P 原子置换一个 Si 原子形成掺杂的立方相 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 模型, 由于立方相 Ca_2Si 模型的 4 个 Si 原子处于等效位置, P 原子的置换位置对体系的影响较小, 计算采用的立方相 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 模型暂不考虑不同位置置换对体系的影响。

采用基于第一性原理的赝势平面波方法对晶格 (111) 应变进行模拟计算, 即将立方相 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 晶体的晶格常数 a 在其晶胞优化后所得的晶格平衡值的 -8%~4% 范围内以 2% 的比率进行线性变化, 文中所有的计算使用 CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package) 软件包完成^[20]。 首先将 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的体系采用 BFGS (Broyden, Fletcher, Goldfarb and Shannon) 算法进行几何优化, 得到稳定的结构体系。 在优化后得到的稳定结构体系下分别计算不同应变的能带结构、电子态密度和光学性质。 体系的价电子波函数用平面波基矢展开并设平面波的截断能为 330 eV, 迭代收敛精度为 5×10^{-6} eV, 选取广义梯度近似处理交换关联能部分, 交换关联势计算采用 PBE (Perdew Burkner Ernzerhof) 提出的广义梯度近似方法, 采用超软赝势计算离子实与电子之间的相互作用, 计算总能量在倒易空间中进行, 布里渊区积分采用 Monkhorst-Pack 方法, K 点取 $4 \times 6 \times 3$ 。

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函数 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ 来描述, 其中 $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$, $\varepsilon_2 = 2nk$ 。

根据直接跃迁几率的定义和克拉默斯-克勒尼希色散关系可以推导出晶体介电函数的虚部和实部、吸收系数、反射率、复光电导率等计算所依据的理论公式。

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2e}{\varepsilon_0 m^2} \sum_{\text{v.c. BZ}} \int \frac{2dK}{(2\pi)^3} \frac{|a \cdot M_{\text{v.c.}}(K)|^2}{[E_c(K) - E_v(K)]/\hbar} \frac{1}{[E_c(K) - E_v(K)]^2/\hbar^2 - \omega^2}, \quad (1)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\pi}{\varepsilon_0} \left(\frac{e}{m\omega} \right) \left\{ \sum_{\text{v.c. BZ}} \int \frac{2dK}{(2\pi)^3} |a \cdot M_{\text{v.c.}}|^2 \sigma [E_c(K) - E_v(K) - \omega^2] \right\}, \quad (2)$$

$$|a| = \frac{2\omega k}{c} = \frac{4\pi k}{\lambda_0}, \quad (3)$$

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}, \quad (4)$$

$$\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega) = -i \frac{\omega}{4\pi} [\varepsilon(\omega) - 1], \quad (5)$$

式中 e 为电荷量, m 为电子质量, \hbar 为普朗克常数, σ 为电导率, c 为光速, $R(\omega)$ 为反射率, $\sigma_1(\omega)$ 为电导率实部, $\sigma_2(\omega)$ 为电导率虚部, n 为折射率, k 为消光系数, ε_0 为真空中的介电常数, λ_0 为真空中光的波长, C 为导带, V 为价带, BZ 为第一布里渊区, \mathbf{K} 为电子波矢, \mathbf{a} 为矢量势 \mathbf{A} 的单位方向矢量, $M_{\nu c}$ 为跃迁矩阵元, ω 为角频率, $E_c(K)$ 为导带本征能级, $E_v(K)$ 为价带本征能级。

3 结果及讨论

3.1 能带结构

由图1(d)可知,处于平衡状态的 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 是直接带隙半导体,带隙带宽 $E_g=0.51549$ eV。根据 Si^+ 态($3s\sigma, 3s\sigma^*, 3p\sigma, 3p\pi, 3p\pi^*, 3p\sigma^*$)和晶体场分裂的 Ca^{2+} 3d态(e_g 和 t_{2g})对费米面附近的能带结构图作如下描述:插在费米面的三条能带为 Ca^{2+} 3d- e_g 态,导带的第49条带线为 $\text{P}^{5-}, \text{Si}^+$ 的反键态 $3p\pi^*, 3p\sigma^*$,而第10~12条带线为 $\text{P}^{5-}, \text{Si}^+$ 的成键态 $3p\sigma, 3p\pi$;价带的第1~2条带线为 Ca^{2+} 3d t_{2g} 态(带线从价带顶向低能方向数),第3~8条带线为 $\text{P}^{5-}, \text{Si}^+$ 的成键态 $3p\sigma, 3p\pi$ 。当 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 材料受到(111)面应力应变时,晶格常数应变使得其能带结构发生变化,由于晶格常数的变化导致导带底能量的改变,导带底附近的能谷分裂为2组简并能谷,形成导带边和次带边;价带顶能量的变化使得轻、重空穴带分离为2组能峰,形成价带变和次带变。应变的禁带带宽 E_g 则由上移的重空穴带顶和下移的简并能谷决定。图1(a)~(c)为施加压应变后 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的能带图,施加压应变后 Ca^{2+} 3d态受到影响最显著, Ca^{2+} 3d- e_g 态向低能方向偏移, Ca^{2+} 3d t_{2g} 态向高能方向偏移。禁带带宽 E_g 呈现递减变化趋势,当应变达到-8%时, $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 呈现金属特性。图1(e)~(f)为施加张应变后 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的能带图,当施加张应变达2%时, $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 呈现最大直接带隙 $E_g=0.60441$ eV,此后随着张应变的增加, $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 变为间接带隙半导体。计算结果表明无论施加张应变还是压应变,禁带带宽均在减小,与王冠宇等^[15]的结果吻合,同比率的压应变对 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的影响较张应变更为显著。

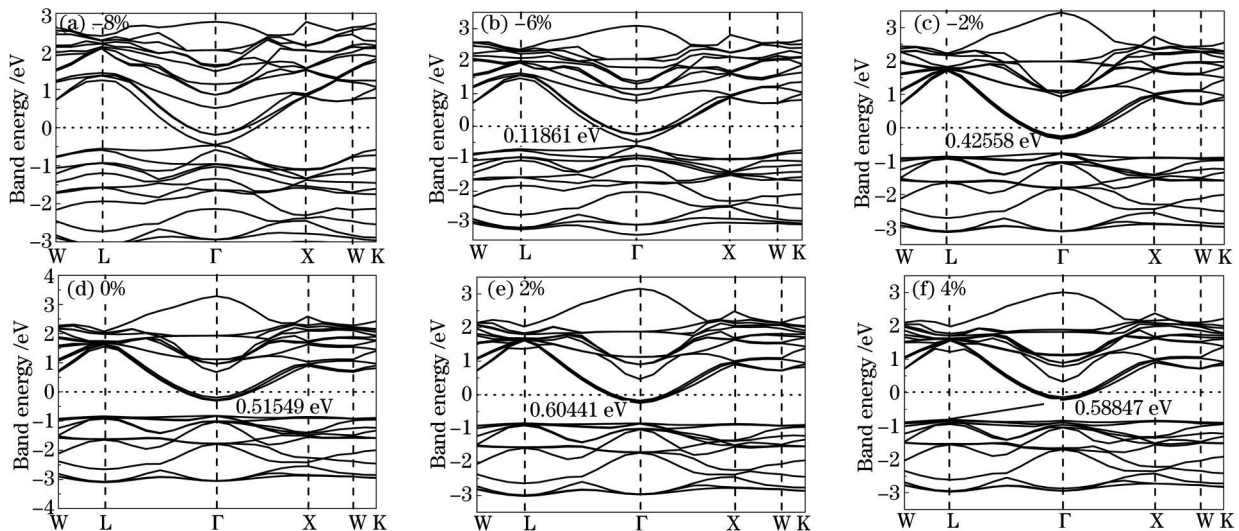


图1 应变为(a) -8%; (b) -6%; (c) -2%; (d) 0%; (e)2%和(f)4%时的能带结构图

Fig.1 Band structures of $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ under the strain of (a) -8%; (b) -6%; (c) -2%; (d) 0%; (e)2% and (f)4%

3.2 光学性质

3.2.1 介电函数

介电函数是沟通带间跃迁微观物理过程与固体电子结构的桥梁,通过介电函数 ε_1 可以得到其他各种光谱信息, $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 作为环境友好型半导体材料,其光谱由能级间电子跃迁所产生。图2为压应变和张应变 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的介电函数图,从图2可知,平衡状态下 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的静态介电常数 $\varepsilon_1(0) = 7.9692$ 。张应变使得 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的静态介电函数随着应变的增加而增加,张应变为2%、4%时对应的静态介电常数 $\varepsilon_1(0)$ 分别为8.3810、8.6431。当压应变为-6%、-2%时,对应的静态介电常数 $\varepsilon_1(0)$ 分别为8.2616、7.4553。随着张应变的增

加介电常数随之增加,且当 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 转变为间接带隙时,介电常数也随着应变的增加而增加;当施加-2%~0%的压应变,介电常数逐渐减小,到达-2%时达到最小值,此后随着压应变的增加介电常数逐渐增大。其原因是在外力作用下晶体场发生变化,晶体中原子核周围的电子云发生畸变使得正负离子中心发生相对位移极化,施加外力作用促使晶体中的电子畸变变得有序,电极化增强。不同应变下的态密度图如图3所示。在相同应变条件下比较张伸应变和压缩应变得出张应变对 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 静态介电常数的影响显著于压应变。介电函数虚部 ϵ_2 的峰值由电子跃迁产生,反映了 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的能带结构及其他光谱信息,与未施加应变相比,施加压应变后介电函数虚部的峰值点增加,说明施加压应变后电子跃迁增强,施加张应变后介电函数虚部的峰值点减少,说明施加张应变后电子跃迁降低,与计算得到的能带结构变化一致,压应变使得导带向低能方向偏移,价带向高能方向偏移;张应变使得导带向高能方向偏移,价带向低能方向偏移。

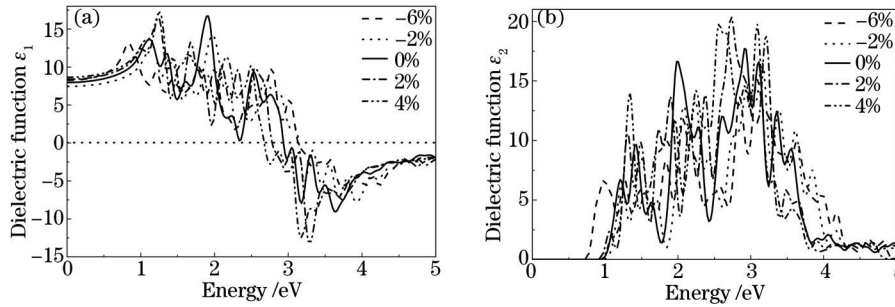


图2 应变为-6%、-2%、0%、2%和4%时的介电函数

Fig.2 Dielectric functions of $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ under the strain of -6%, -2%, 0%, 2% and 4%

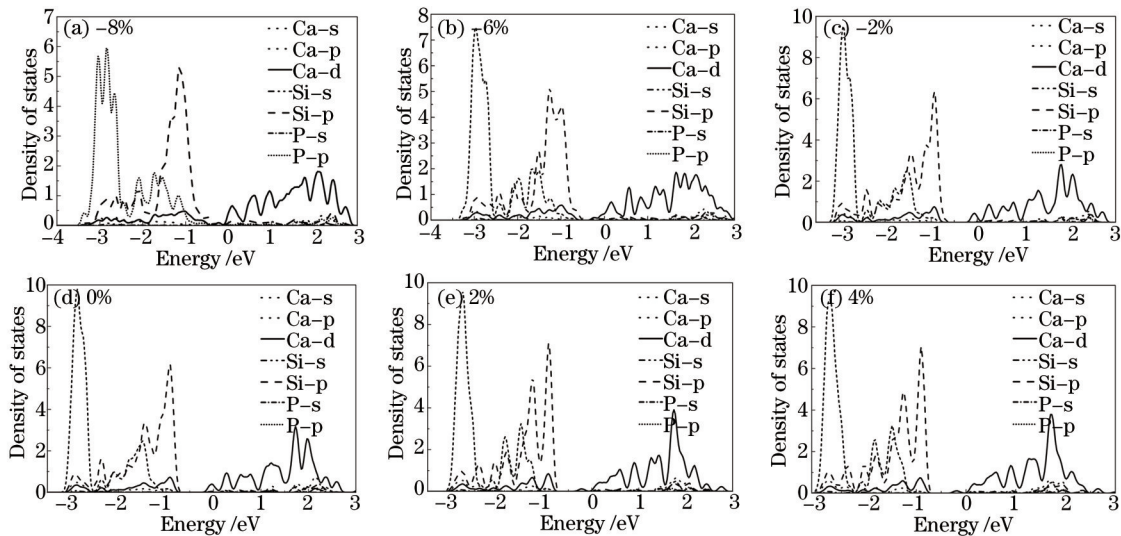


图3 应变为(a) -8%; (b) -6%; (c) -2%; (d) 0%; (e)2%和(f)4%时的态密度图

Fig.3 Qensity of states of $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ under the strain of (a) -8%; (b) -6%; (c) -2%; (d) 0%; (e)2% and (f)4%

3.2.2 复折射率

由复折射率和介电函数的关系 $\epsilon_1 = n^2 - k^2$, $\epsilon_2 = 2nk$ 得到 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的复折射率,图4为 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的折射率和消光系数。由图4(a)可知,平衡状态下 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的折射率为2.823。张应变使得 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的折射率随着应变的增加而呈准线性增加趋势,张应变为2%、4%时对应的折射率分别为2.895、2.930。当施加-2%的压应变时, $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的折射率达到最小值2.730,随着压应变的增大折射率增加,压应变为-6%时对应的折射率为2.8743。当光子能量为5.5~6.5 eV时,折射率趋于零,这与下文的反射谱在该能量范围内反射率趋于1相对应,表明(111)面在应变作用下 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 在该能量范围呈现出金属反射特性。计算所得折射率 n_0 与静态介电常数 $\epsilon_1(0)$ 完全对应。由图4(b)可知,其变化曲线在1 eV附近漂移,漂移的能量大小与带隙变化的数值相等,当施加压应变时消光系数 k 的峰值和数目与未施加应变相比逐渐减弱,表明在这个能量范围内施加压应变其光学响应减弱,同时消光系数在带边表现出强烈的吸收特征;而施加张应变时消光系数 k 的峰值和数目逐渐增加,表明在这个能量范围内施加压应变其光学响应增强。原因是应变使得 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 晶体中原子核周围的电子云

发生畸变,能带结构和费米面附近的电子态密度分布发生变化,对电子跃迁产生影响。

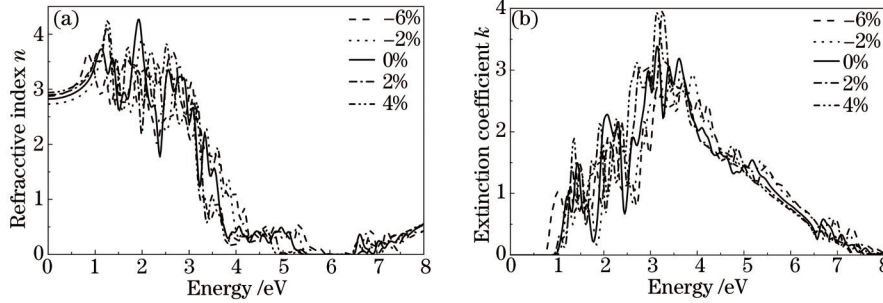


图4 应变为-6%、-2%、0%、2%和4%时的折射率和消光系数

Fig.4 Refractive index and extinction coefficient of $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ under the strain of -6%, -2%, 0%, 2% and 4%

3.2.3 吸收谱

由吸收系数和介电函数的关系 $a(\omega) = \frac{\omega}{nc} \varepsilon_2(\omega)$ 可以得到 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的吸收谱如图5所示。无应变时 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的吸收系数 $\alpha(\omega)$ 在 3.621 eV 处达到最高峰 187635 cm^{-1} 。吸收系数 $\alpha(\omega)$ 在 5.68~5.73 eV 和 6.24~6.37 eV 的能量范围内吸收为零,与下文在反射图(图6)中发生全反射的能量范围相对应。当施加-6%、-2% 压应变时吸收边向低能方向偏移,施加 2%、4% 张应变时吸收边略向高能方向漂移;施加-6%、-2% 压应变时吸收峰峰值和峰数均减少,施加 2%、4% 的张应变时吸收峰峰值和峰数均增加,结果与介电函数虚部吻合。当施加-2%、2%、4% 应变时,吸收系数 $\alpha(\omega)$ 分别在 5.837~5.925 eV、6.435~6.501 eV 及 5.726~5.903 eV、6.169~6.324 eV 和 5.593~5.682 eV、5.903~6.324 eV 能量范围内吸收为零,由此可知施加压应变可增强 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 对光的吸收,而施加张应变可降低 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 对光的吸收。计算结果与折射谱图和反射谱图对应,可见施加张应变发生全反射的能量范围增大,且向低能方向移动;施加压应变发生全反射的能量范围减小,当应变达到-6%时全反射消除。

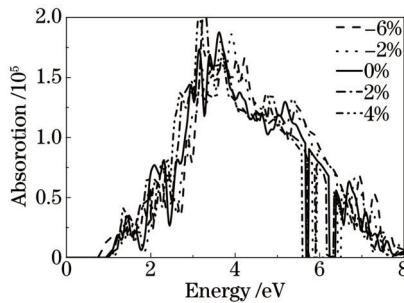


图5 应变为-6%、-2%、0%、2%和4%时的吸收谱

Fig.5 Absorption spectra of $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ under the strain of -6%, -2%, 0%, 2% and 4%

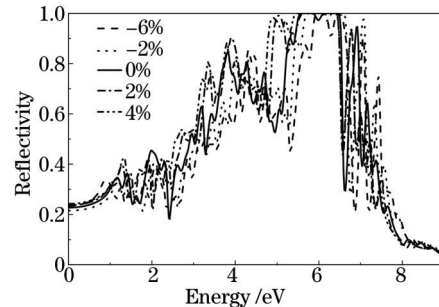


图6 应变为-6%、-2%、0%、2%和4%时的反射谱

Fig.6 Reflection spectra of $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ under the strain of -6%, -2%, 0%, 2% and 4%

3.2.4 反射谱

由复折射率和反射谱的关系 $R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}$ 得到反射谱。由图6可知,没有施加应变时 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的反射主要发生在 5.216~6.546 eV 的能量范围内;施加-6%、-2% 的压应变后,反射分别发生在 5.549~6.679 eV、5.394~6.656 eV 的能量范围内;施加 2%、4% 的张应变,反射分别发生在 5.884~6.501 eV、4.751~6.501 eV 的能量范围内,反射率达到 80% 以上甚至发生全反射现象,呈现出金属反射特性。由此可见压应变(压缩晶格)可以减小 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 发生反射的区域,张应变(拉伸晶格)会增大 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 发生反射的区域,反射谱与折射率和吸收系数完全对应。

4 结 论

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,模拟研究了应变作用下 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ (111) 面发生晶格形变时的能带结构、介电函数、复折射率、吸收谱、反射谱等光学性质。计算得到: $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ (111)

面在晶格发生-8%~0%压应变时, $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 仍为直接带隙半导体, 但带隙随着应变增加而减小; $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ (111)面在晶格发生0%~2%张应变时, $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 属于直接带隙且禁带宽度随着张应变的增加而增加; 当张应变大于2%时, $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 转变为间接带隙半导体; 张应变为4%时, 间接带隙 $E_g=0.58847\text{eV}$ 。 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的介电常数和折射率随着张应变的增加而增加, 且当 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 转变为间接带隙时, 介电常数也随着应变的增加而增加; 当施加-2%~0%的压应变时, 介电常数逐渐减小, 到达-2%时达到最小值, 此后随着压应变的增加介电常数逐渐增大。施加压应变时吸收系数随着应变的增大而减小, 施加张应变时吸收系数随着应变的增大而增大。综上所述, 应变可以改变 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 的电子结构和光学常数, 是调节 $\text{Ca}_2\text{P}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$ 光电传输性能的有效手段。

参考文献

- 1 Lebègue S, Arnaud B, Alouani M. Calculated quasiparticle and optical properties of orthorhombic and Ca_2Si [J]. Phys Rev B, 2005, 72(8): 1-8.
- 2 Imai Y, Watanabe A. Energetics of alkaline-earth metal silicides calculated using a first-principle pseudo potential method[J]. Intermetallics, 2002, 10(4): 333-341.
- 3 Matsui H, Kuramoto M, Ono T, *et al.*. Growth of Ca_2Si layers on $\text{Mg}_2\text{Si}/\text{Si}(111)$ substrates[J]. Cryst Growth, 2002, 237-239: 2121-2124.
- 4 Cheng J, Yang Y Y, Liang Y. Selective growth of Ca_2Si film or Ca_5Si_3 film in Ca-Si system by R.F. MS by Annealing[C]. 2012 International Conference on Manipulation, Manufacturing and Measurement on the Nanoscale, 2012. 75-79.
- 5 Imai Y, Watanabe A, Mukaida M. Electronic structures of semiconducting alkaline-earth metal silicides[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2003, 358(1-2): 257-263.
- 6 Migas D B, Miglio L, Shaposhnikov V L, *et al.*. Comparative study of structural, electronic and optical properties of Ca_2Si , Ca_2Ge , Ca_2Sn and Ca_2Pb [J]. Phys Rev B, 2003, 67(20): 205203.
- 7 Takagi N, Sato Y, Matsuyama T, *et al.*. Growth and structural properties of Mg_2Si and Ca_2Si bulk crystals[J]. Appl Surf Sci, 2005, 244(1-4): 330-333.
- 8 Busch C, Junod P, Katz U, *et al.*. Electrical conductivity of the intermetallic compounds Ca_2Si , Ca_2Sn , Ca_2Pb , ZnSb [J]. Helv Phys Acta, 1954, 27(33): 193-197.
- 9 Yang Y Y, Xie Q. The selective growth of a single phase calcium silicide film in the Ca-Si system by R.F. magnetron sputtering[C]. 2nd International Conference on Anti-Counterfeiting, Security and Identification, 2008. 360-363.
- 10 Yang Y Y, Xie Q. Growth characteristics of calcium silicides film from the deposited Ca films at the different sputtering Ar pressure[J]. ISCSCT, 2008. 484-487.
- 11 Yang Y Y, Xie Q. A single phase semiconducting Ca-silicide film growth by sputtering conditions, annealing temperature and annealing time[J]. J Materials Science, 2009, 44(14): 3877-3882.
- 12 Yang Y Y, Xie Q. Selective growth of Ca_2Si film by annealing from the different thickness of Ca films by sputtering[J]. J Materials Science and Engineering, 2009, 27(5): 675-678.
- 13 Yang Y Y, Xie Q. The selective growth of a single phase Ca-silicide film from Ca-Si system by R.F. magnetron sputtering and by annealing[J]. International Journal of Information and Electronics, 2008, 2(4): 6-9.
- 14 Ma Jianli, Zhang Heming, Song Jianjun, *et al.*. Energy band structure of uniaxial-strained silicon material on the (001) surface arbitrary orientation[J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(2): 027101.
马建立, 张鹤鸣, 宋建军, 等. (001)面任意方向单轴应变硅材料能带结构[J]. 物理学报, 2011, 60(2): 027101.
- 15 Wang Guanyu, Ma Jianli, Zhang Heming, *et al.*. Model of intrinsic carrier concentration of [110]/(001)-uniaxial strained Si[J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(7): 077105.
王冠宇, 马建立, 张鹤鸣, 等. [110]/(001)单轴应变Si本征载流子浓度模型[J]. 物理学报, 2011, 60(7): 077105.
- 16 Cui Dongmeng, Jia Rui, Xie Quan, *et al.*. First-principles calculations of stressed Ru_2Si_3 [J]. Chinese Journal of Luminescence, 2011, 32(9): 907-912.
崔冬萌, 贾锐, 谢泉, 等. Ru_2Si_3 在应力作用下的第一性原理研究[J]. 发光学报, 2011, 32(9): 907-912.
- 17 Niu Yufeng, Zhuang Yiqi, Hu Huiyong, *et al.*. Band structure of strained $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ by the first principles investigation[J]. Research & Progress of SSE, 2009, 29(3): 315-320.
牛玉峰, 庄奕琪, 胡辉勇, 等. 第一性原理研究应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 能带结构[J]. 固体电子学研究与进展, 2009, 29(3): 315-

320.

- 18 Hu Zixiang, Wu Yuxi, Gu Shulin, *et al.*. Varying characteristics of crystal structures and optical properties of ZnO under pressure[J]. Chinese Journal of Quantum Electronics, 2010, 27(5): 613-619.
胡智向, 吴玉喜, 顾书林, 等. 外压调制下 ZnO 晶体结构与光学性质变化特性的研究[J]. 量子电子学报, 2010, 27(5): 613-619.
- 19 Yan Wanjun, Zhang Chunhong, Gui Fang, *et al.*. Electronic structure and optical properties of stressed β -FeSi₂[J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(7):0716001.
闫万珺, 张春红, 桂放, 等. 应力调制下 β -FeSi₂ 电子结构及光学性质[J]. 光学学报, 2013, 33(7): 0716001.
- 20 Segall M D, Lindan P J D, Probert M J, *et al.*. First-principles simulation: Ideas, illustrations and the CASTEP code[J]. Journal of Physics, 2002, 14(11): 2717-2744.