

# The Progress of Fe<sub>3</sub>Si Intermetallics

Zhan Chen, Jin-min Zhang\*, Pei-qiang Zhu, Quan Xie, Dao-jing Ma, Yan Wang

Institute of New Optoelectronic Materials and Technology, College of Science, Guizhou University, Guiyang, 550025, China

Email: chanlien@126.com, jmzhang@gzu.edu.cn

**Abstract:** The research progress of Fe<sub>3</sub>Si intermetallics is reviewed. The basic properties of Fe<sub>3</sub>Si are analyzed and discussed in detail, such as the basic structure characteristics, magnetic property, selective site substitution of transition metal elements, phase transition, diffusion mechanism, environmental embrittlement and fracture mechanism, high temperature creep and electronic structure properties and so on. Finally the main problems of studies for intermetallic compounds Fe<sub>3</sub>Si are given at present.

**Keywords:** Fe<sub>3</sub>Si intermetallics; magnetic property; phase transition; diffusion mechanism; environmental embrittlement

## 金属间化合物 Fe<sub>3</sub>Si 的性质研究

陈 站, 张晋敏\*, 朱培强, 谢 泉, 马道京, 王 衍

贵州大学新型光电子材料与技术研究所, 贵州大学理学院, 贵阳, 550025, 中国

Email: chanlien@126.com, jmzhang@gzu.edu.cn

**摘 要:** 本文综述了金属间化合物 Fe<sub>3</sub>Si 研究现状。对 Fe<sub>3</sub>Si 晶体的结构、磁学性质、过渡金属元素的占位特性、扩散机制, 环境脆性和断裂机制, 高温蠕变性质以及电子结构性质的研究等进行了分析和讨论, 指出了当前金属间化合物 Fe<sub>3</sub>Si 研究面临的主要问题。

**关键词:** Fe<sub>3</sub>Si 金属间化合物; 磁学性质; 相变; 扩散机制; 环境脆性

### 1 引言

Fe-S 化合物因其在电子学, 热电, 光电和磁学等领域有着广泛的应用, 近年来成为人们关注的热点。由于其多变的电子学和磁学的性质, Fe-Si 化合物被认为是在热稳定接触<sup>[1,2]</sup>, 太阳能电池器件<sup>[3]</sup>, 基于冷光的发光光源<sup>[4]</sup>, 基于磁阻的转换器件和自旋电子学器件<sup>[5]</sup>等领域有潜在应用前景的材料之一。其中金属间化合物 Fe<sub>3</sub>Si 是一种重要的磁性功能材料, 具有高硬度, 优异的抗腐蚀性能和低电导率及优异的软磁性能, 不仅在高频信息领域有希望代替普通硅钢片, 而且还被广泛用作音频和视频磁头材料和卡片阅读器的磁头材料。此外, Fe<sub>3</sub>Si 合金具有负的温度系数, 是一种有特殊性质的导体, 有可能成为新型的电阻材料<sup>[6]</sup>, 还

可用于硅钢薄板的表面涂层<sup>[7]</sup>。

### 2 Fe<sub>3</sub>Si 的结构和物理性质

#### 2.1 Fe<sub>3</sub>Si 的晶体结构和基本的物理参数

Table 1. Basic physical and mechanical parameters of Fe<sub>3</sub>Si.

表 1. Fe<sub>3</sub>Si 基本的物理和力学参数

晶系	空间群	晶格常数 (nm)	密度 (kg/m <sup>3</sup> )	熔点 (K)	杨氏模量 (Pa)
立方	Im3m	0.564	7080	1393 (D0 <sub>3</sub> )	203.07×10 <sup>9</sup>
热膨胀系数			等压热容 Cp		
11.4×10 <sup>-6</sup> K <sup>-1</sup> (293K~1143K)			98.30 Jmol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> (293 K)		
11.0×10 <sup>-6</sup> K <sup>-1</sup> (1143K~1343K)			71.35+87.38×10 <sup>-3</sup> T+148.93×10 <sup>-2</sup> T <sup>2</sup> (273 K~800 K)		

金属间化合物 Fe<sub>3</sub>Si 有很广泛的化合范围 (8%~27at.%Si) 室温下为 D0<sub>3</sub>(cF16) 结构。随着加热处理的

**基金项目:** 贵州省自然科学基金(黔科合 J 字[2008]2002); 贵州省国际合作项目(黔科合外 G 字[2009]700113); 贵阳市科技局大学生项目([2007]筑科计合同字第 6-3 号, [2009]筑科计合同字第 13 号, 第 8 号); 贵州大学引进人才项目(贵大人基合字[2009]002 号)。

\*通讯作者:张晋敏, 0851-3610027, jmzhang@gzu.edu.cn.

温度, 首先发生 B<sub>2</sub>(cF2)结构的转变, 加热或者冷却过程中的确切的相变温度和真实的相变次序由成分而定。Fe<sub>3</sub>Si 合金优秀的抗腐蚀性和磁性吸引着商业应用。然而, Fe<sub>3</sub>Si 的主要缺陷是它极端的脆和硬<sup>[8]</sup>。因此对于 Fe<sub>3</sub>Si 一些基本性质还需要进一步的认识与改善。表 1 为其具体的物理和力学参数<sup>[9]</sup>。

铁磁性硅化物 Fe<sub>3</sub>Si 有三个相(A<sub>2</sub>B<sub>2</sub>和 D0<sub>3</sub>), 其中有着面心立方结构的 D0<sub>3</sub>相是稳定相, 估算得到其在费米能级上是自旋极化的<sup>[10]</sup>。在室温下已经证实存在自旋注入, 因此 Fe<sub>3</sub>Si 在电子的自旋注入领域有潜在的应用前景<sup>[11]</sup>。

Table2. Neighbour configuration in stoichiometric Fe<sub>3</sub>Si

表 2. 符合化学计量比的 Fe<sub>3</sub>Si 中近邻的描述

近邻	1	2	3	4	5	6
R <sup>a</sup>	0.43	0.5	0.705	0.83	0.86	1.00
A,C	4B	6A,C	12A,C	12B	8A,C	6A,C
	4D			12D		
B	8A,C	6D	12B	24A,C	8D	6B
D	8A,C	6B	12D	24A,C	8B	6D

其中距离 R<sup>a</sup> 被表示为晶格常数 a 的分数。

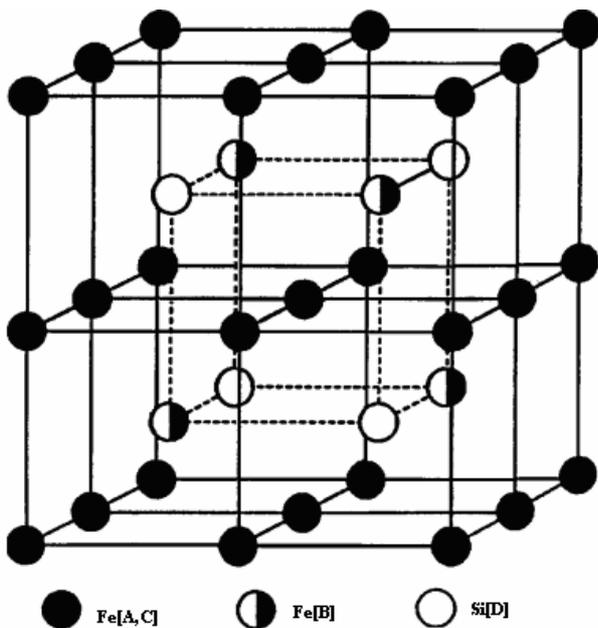


Figure. 1 Schematic drawing of the Fe<sub>3</sub>Si structure, showing the four different sites

图 1 四种不同位置的 Fe<sub>3</sub>Si 结构示意图

Fe<sub>3</sub>Si 的居里温度为 840K, 具有面心立方结构 Fe<sub>3</sub>Si 晶格常数为 0.564 nm, 这与 Si(0.543 nm)的晶格失配度大约为 4%。符合化学计量比的有序 Fe<sub>3</sub>Si(Fe<sub>75</sub>Si<sub>25</sub>)晶体是一个 DO<sub>3</sub>的结构, 每个晶胞内有四个原子, 坐标分别为 A(0,0,0)、B(0.25,0.25,0.25)、C(0.5,0.5,0.5) 和 D(0.75,0.75,0.75)。Fe<sub>3</sub>Si 在 803~843 K 下是铁磁性的<sup>[12]</sup>, 在有序 Fe<sub>3</sub>Si 晶体中 Fe 原子占据三个亚晶格 A,B 和 C 的位置, 而 Si 原子填充亚晶格 D 位置。它拥有两种不同的 Fe 位 A, C 和 B<sup>[13]</sup>, 这里的两种 Fe 位置在晶体学和磁学上性质不同, 可看作是 Heusler 合金 Fe<sup>II</sup>2Fe<sup>I</sup>Si(DO<sub>3</sub> 类型), 磁矩分别为  $\mu_B^I = 2.2 \mu_B/\text{atom}$  和  $\mu_B^{II} = 1.35 \mu_B/\text{atom}$ , 这里的  $\mu_B$  是玻尔磁子, 如图 1<sup>[14]</sup>。表 2 说明了具有化学计量比的 Fe<sub>3</sub>Si 的邻近位置原子的排列<sup>[15]</sup>。

## 2.2 Fe<sub>3</sub>Si 的磁学性质

目前, Fe<sub>3</sub>Si 的研究主要集中在其磁学性质上, 被作为软磁材料常应用于发电机和变压器的铁芯, 还制成了音频或者视频磁头, 卡片阅读器, 特别是在高频信息领域方面尤为明显。另外薄膜 Fe<sub>3</sub>Si 也开始用于磁阻存储器中, 并且可利用其自旋电子学的性质制备自旋电子器件。

极化中子实验和饱和磁化强度测量<sup>[11]</sup>证实对于 Fe<sub>3</sub>Si 中两种类型的 Fe 原子的磁矩非常的不同。Fe<sub>3</sub>Si 中 B 位置的 Fe 原子磁矩为  $M_{\text{Fe[B]}} = (2.2-2.4)\mu_B$ , 这与体心立方 Fe 原子的接近, 然而处于 A 和 C 位置的 Fe 原子的磁矩为  $M_{\text{Fe[A,C]}} = (1.1-1.35)\mu_B$ , 明显小于前者。另外还发现处于 D 位的 Si[D]的磁矩为负值  $-0.07\mu_B$ 。同时 Swintendick<sup>[16]</sup>也在理论上用非自旋极化增广平面波法研究了 Fe<sub>3</sub>Si 的电子结构, 然后把交换劈裂性质考虑在内来解释所观测到的磁矩。

Williams<sup>[17]</sup>使用增广球面波法完成了从头开始的自洽局域自旋密度(LSD)估算, 获得了Fe原子的磁矩: A、C位置为  $1.36\mu_B$ , B位置为  $2.48\mu_B$ , 与实验相一致。Herfort<sup>[18]</sup>使用超导量子干涉器测磁法分析了在 GaAs(113)上外延生长的Heusler合金Fe<sub>3</sub>Si薄膜的磁各向异性, 薄膜层显示出一个沿着  $\langle 03\bar{1} \rangle$  易磁化轴占主导的四重磁各向异性。Fe<sub>3</sub>Si薄膜的每个铁原子的平均磁矩在300 K下确定为  $(0.73 \pm 0.06) \mu_B$ 。符合化学计量比的样品的磁各向异性常数  $K_1$  值等于  $(3.0 \pm 0.6) \times 10^3 \text{ J/m}^3$ , 这跟那些报道的块体Fe<sub>3</sub>Si和Fe<sub>3</sub>Si/GaAs(001)薄膜的值符合得很好<sup>[19]</sup>。

### 3 Fe<sub>3</sub>Si 中过渡金属元素占位的研究

过渡金属杂质取代 Fe<sub>3</sub>Si 占据择优位置已经被好几位研究者<sup>[15]</sup>报道。来自大量的核磁共振(NMR)研究<sup>[20]</sup>, 中子衍射<sup>[21]</sup>和穆斯堡尔实验<sup>[22]</sup>确定了过渡金属杂质在元素周期表中 Fe 左边的元素(如 Ti, V, Cr 和 Mn)有选择地替代 Fe(B)原子, 同时在 Fe 的右边和下面的元素(Co, Ni, Ru, Rh, Pd, Os 和 Ir)替代 Fe(A, C)原子。

Fe<sub>3</sub>Si 的一个独特的性质是 3d 过渡金属杂质在两个非等效晶格位置上会有选择地替代 Fe。在周期表中 Fe 左边的元素(即 Mn 或者 V)对于 Fe[B]表现出强烈的优先权, 但是对于 Fe 右边的元素, 像 Co 或者 Ni 则会选择 Fe[A] 或者 Fe[C]。这些位置优先权也会出现在 Fe<sub>3-x</sub>V<sub>x</sub>Si 和 Fe<sub>3-x</sub>Mn<sub>x</sub>Si 之中。这里的 V 和 Mn 专门地替代 Fe[B] 达到与 V(x=0.75) 或者 Mn(x=0.5)一样的浓度。实验上, 这些优先位置特性已经被核磁共振(NMR)、中子衍射、穆斯堡尔谱、X 射线吸收近边结构(XANES)和广延 X 射线吸收精细结构(EXAFS)的研究所证明<sup>[14]</sup>。

### 4 Fe<sub>3</sub>Si 的相变和扩散机制

Zhang 等人<sup>[23]</sup>研究了两个不同类型 Fe-Si 系统的块体扩散偶, 即 Fe/Si 和 Fe/Fe<sub>3</sub>Si, 研究的侧重点是 Fe<sub>3</sub>Si 的形成和生长。结果显示在 Fe/Si 扩散偶中首先形成了 Fe<sub>3</sub>Si, 接着是 FeSi, 最后是 FeSi<sub>2</sub>。Fe<sub>3</sub>Si 有很宽泛的化学计量比 (10%~25at.%Si), 然而, 仅仅是理想配比的 Fe<sub>3</sub>Si 出现在 Fe/Si 扩散偶的 Fe<sub>3</sub>Si 扩散层中, 而非理想配比的 Fe<sub>3</sub>Si 形成在 Fe<sub>3</sub>Si/Fe 扩散偶中。Fe<sub>3</sub>Si 的自由能和 Fe-Si 亲和力能够用来解释 Fe<sub>3</sub>Si 的形成行为和 Fe<sub>3</sub>Si 晶格中的原子扩散机制。

一般来说, 在相转变中, 有两个主要的控制相变的因素, 即热力学(自由能的改变)和动力学。考虑化学和磁学相互作用使用 Bragg-Williams-Gorsky<sup>[24]</sup> (BWG)模型能够估算自由能, 在固定的温度下 Fe<sub>3</sub>Si 自由能的改变随着铁浓度的减少而降低。在 973K 时对以 Si 原子分数为函数 Fe<sub>3</sub>Si 的自由能进行估算得到的结果如图 2, 可以看到随着 Si 分数从 0.12 增加到 0.25(12-25at.%), 自由能减少。热力学上符合化学计量比的 Fe<sub>3</sub>Si 是最稳定的形式是 Fe<sub>3</sub>Si, 而且比非化学计量比的 Fe<sub>3</sub>Si 优先形成。另外扩散过程影响扩散偶中的反应动力学, Bakker 等人<sup>[26]</sup>提出有序 D0<sub>3</sub> 晶格中的扩散过程, 占主导的元素(此种情况下是 Fe) 仅仅在三个 Fe 亚格点之间跳跃, 即 A, C 和 B 亚格点。这个

模型已经被 Speier 和 Vogl<sup>[26]</sup>使用准弹性穆斯堡尔谱(QMS)和准弹性不相干中子散射(QNS)证实。Fe<sub>3</sub>Si 中近邻原子和硅原子之间存在强烈的亲和力, 这也被穆斯堡尔谱证实。人们发现硅原子邻近的铁原子共用他们的 3s 和 3p 电子, 所以填充了铁原子的 3d 态。Garba 和 Jacobs<sup>[27]</sup>使用紧束缚模型估算了 Fe<sub>3</sub>Si 的亲和力, 得出邻近的硅和铁原子之间存在比邻近的铁与铁原子之间更强大的亲和力。所以当铁原子在 Fe<sub>3</sub>Si 中扩散时, 铁原子比硅原子更容易占据铁位置。如果符合化学计量比的 Fe<sub>3</sub>Si 中的铁原子仅仅通过 A, C 和 B 位置扩散, 系统的结构和自由能将不会改变。

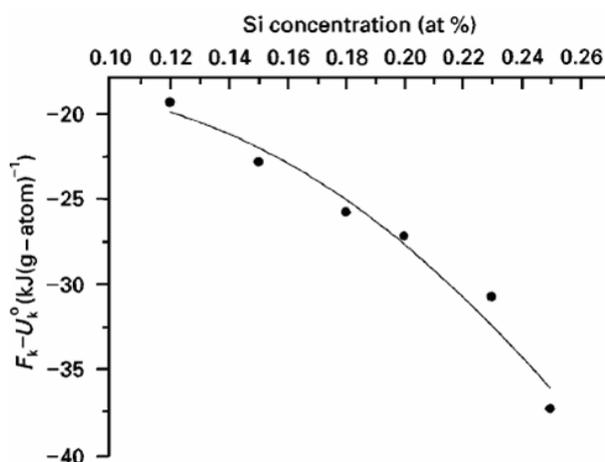


Figure 2. Plot of the difference between the configurational free energy term  $F_K$  and the internal energy term  $U_K^0$ , which is not a function of the order parameter, versus silicon atom fraction at 973K.

图2 973K 下 Fe<sub>3</sub>Si 中 Si 原子分数以及对其自由能估算的函数关系

Zhao<sup>[28]</sup>等人研究了 Fe 和 Si 的粉末(原子比 3:1)的机械合金化和紧着的不同退火条件下的热处理, 分析了机械合金化过程和接下来的热处理过程中的相成分及结构的变化。结果显示 Fe 的 XRD 峰逐渐变宽减弱并且随着球磨时间的增加从低角度向高角度转移, 在球磨 20 小时后主要的相转变成了  $\alpha$ -Fe(Si) 固溶体。当样品在 673K 以下热处理, 主要的相仍然为  $\alpha$ -Fe(Si)。然而在高于 673K 以上加热时, 能够发现有序 Fe<sub>3</sub>Si 相, 随着温度的增加 Fe<sub>3</sub>Si 的 XRD 峰变得尖锐。

### 5 Fe<sub>3</sub>Si 的环境脆性和断裂机制

Chen 等人<sup>[29]</sup>利用俄歇电子能谱(AES)和 X 射线电子能谱(XPS)研究了多晶 Fe<sub>3</sub>Si 合金与氧气和水蒸气的表面反应。结果显示样品的表面首先吸收氧气和

水蒸气, 然后它们择优的同合金中的组成部分 Si 反应形成  $\text{SiO}_2$ 。室温下发生分子吸收和水蒸气以及氧气的电离吸收, 但是分子吸收相对比较大。温度从 293K 增加到 473K 会推延表面的反应。基于表面反应的研究, Chen 等研究预测  $\text{Fe}_3\text{Si}$  合金在水蒸气中易于发生环境脆化, 并且环境脆化的严重程度可能与化学计量比密切相关。

Peng<sup>[8]</sup>实验了实验环境对  $\text{Fe}_3\text{Si}$  合金的易碎行为的影响, 发现  $\text{Fe}_3\text{Si}$  合金的断裂强度  $\sigma_b$  按照以下的顺序减小: 氧气, 空气和氢气。在不同的实验环境中其断裂韧性表现为: 在氧气中为  $K_{IC}$  为  $11.5 \pm 0.3 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ , 在水蒸气中为  $8.6 \pm 0.4 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ 。断裂韧性的减小归因于 Si 和水在环境中的反应。因此环境脆变应归因于来自于空气水分释放的氢或者室温下氢气的存在。作者还在研究中发现  $\text{Fe}_3\text{Si}$  合金表面反应:  $\text{Si} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{SiO}_2 + 2\text{H}_2$ , 已经被 XPS 和 AES 证实。因此实验将  $\text{Fe}_3\text{Si}$  合金的本质脆性同环境影响的脆性区分开做出了贡献, 利用 SEM 发现  $\text{Fe}_3\text{Si}$  合金的断裂机制在氧气中是穿晶断裂, 但是在氢气和水蒸气中则变成了晶间断裂。

U. Kettner<sup>[30]</sup>等人发现高的Pierles-Nabarro应力和反相晶界能量是造成 $\text{Fe}_3\text{Si}$ 合金脆性的原因。人们通过控制快速冷凝的颗粒尺寸和控制化学气相沉积(CVD)中的氧气含量来改善Fe-13 at.%Si(Fe-6.5 wt% Si)的韧性<sup>[31]</sup>。

## 6 $\text{Fe}_3\text{Si}$ 的高温蠕变特性和电子结构及性质

Oertel 等<sup>[32]</sup>研究了符合化学计量比的  $\text{Fe}_3\text{Si}$  单晶在温度 723K 到 1123K 的高温蠕变特性, 压力  $\sigma$  设定在 40 到 250 MPa 时的蠕变特性, 发现对于含量少于 25at.% Si 的晶体的稳定的蠕变速率跟温度的关系能够通过指数函数  $\exp(-\Delta H_{\text{exp}}/kT)$  来描述, 对于 Fe-26at.% 样品仅仅在低于 773K 和高于 873K 时显示出指数关系。在这个中间温度范围相互关系是微弱的, 这暗示在这个中间范围存在两个相。实验结果与假定相界不能阻碍位错的运动相一致, 并且在这两个相中位错速度也是不同的。

在磁学短程有序性和自旋波的研究中, Blanckenhagen<sup>[33]</sup>基于一个假设即磁学短程有序性这个前提, 来通过实验验证在高于居里温度  $T_c$  之上存在自旋波。结果中子散射实验证实  $\text{Fe}_3\text{Si}$  中存在磁学短程有序性, 而且温度达到居里温度  $T_c$  以上的 250 K 时探测到了自旋波。但是并没有解释这种短程有序的稳

定性。Leoni<sup>[34]</sup>使用 Heisenberg 模型研究了有序铁磁性合金  $\text{Fe}_3\text{Si}$  在非相互作用自旋波近似中的自旋波激发的扩散规律, 给出了  $k$  矢量 ( $|\vec{k}| \ll 1/a$ ) 以及布里渊区中的主要点和对称线的扩散关系的明确表达, 详细地写下了在这些情况下自旋波状态的对称性质, 显示出当考虑到在这些合金中自旋波的中子散射时它们的作用。K.Szymański<sup>[35]</sup>等人利用穆斯堡尔谱研究了  $\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x$  合金的有序和无序特性, 给出了修正厚度效应后的图谱, 短程有序和长程有序参数也使用穆斯堡尔谱估算出来了, 还确定了不同位置中的原子的分布, 发现对于  $x < 0.25$  的合金的轻微无序的主要原因是来自 A 位置的 Fe 原子跟处于 D 位置的 Si 原子的相互交换位置, 然而对于  $x > 0.25$  的情况, B 位置的无序性又占据优势。

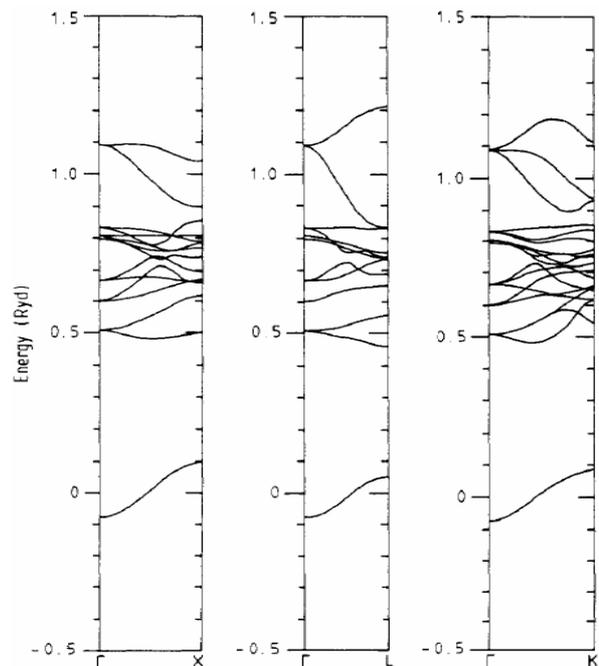


Figure 3. The calculated band structure along several symmetry directions for  $\text{Fe}_3\text{Si}$

图 3. 对  $\text{Fe}_3\text{Si}$  沿着几个不同对称方向的能带结构的估算

Garba 和 Jacobs<sup>[36]</sup>应用基于经验的紧束缚哈密顿函数的递推算法完成了  $\text{Fe}_3\text{Si}$  中的掺杂元素 Mn, Co 替代不同铁位置的电子结构的理论研究。由于金属间化合物  $\text{Fe}_3\text{Si}$  中有两个非等效的 Fe 位置, 分别是立方对称的 Fe[B]和四面体对称 Fe[A,C], 所以结果显示来自过渡金属元素的杂质在热平衡情况下有一个明显的趋向就是择优地占据两种不同位置类型中的其中一

个。作者还在文中估算了  $\text{Fe}_3\text{Si}$  的能带结构, 如图 3 所示, 对于不同位置和不同自旋取向的  $\text{Fe}_3\text{Si}$  的电子态密度, 以及两个可能的位置的上被 Mn 和 Co 杂质占据时的局域电子态密度也进行了估算。I. N. Shabanova<sup>[37]</sup>等人研究了  $\text{Fe}_3\text{C}$ 、 $\text{Fe}_3\text{Al}$ 、 $\text{Fe}_3\text{Si}$  以及它们的单一组成成分从 293K 到 1273K 温度范围的内层电子和价电子的能带, 从 Fe 2p<sub>3/2</sub>, C 1s, Si 2p 和 Al 2p 的电子态的变化中证实了电子从 Fe 迁移到 C, 从 Al 和 Si 迁移到 Fe, 发现组分中的第二个原子的类型在确定化合物的电子结构上起着决定性作用, 并且非过渡元素组分的多能带结构也影响着价带的形成。

## 7 总结

综上所述, 对比国内外研究的特点, 发现国外对于金属间化合物  $\text{Fe}_3\text{Si}$  的研究无论在深度和广度上都走在了前面, 广泛涉及到包括  $\text{Fe}_3\text{Si}$  的磁学性质, 电子结构的研究, 过渡金属占位, 高温蠕变特性, 相转变和原子扩散等各种物理性质上。相比之下, 国内在理论上的研究还相当少, 基本处在起步阶段且差距较大。虽然是这样, 但国内外在金属间化合物  $\text{Fe}_3\text{Si}$  的性质研究的过程中仍存在理论上的不足。虽然  $\text{Fe}_3\text{Si}$  的结构特点已经很明确了, 但是对于影响  $\text{Fe}_3\text{Si}$  的本质脆性的因素还没有完全搞清楚, 从环境因素和电子结构等理论角度分析影响其本质脆性的解释还很少; 另外对于它的磁学性质, 电子结构的特点, 过渡元素占位以及相变机制等内容还需要进一步深入研究。

## References(参考文献)

- [1] V. Svercek, O. Ersen, T. Dintzer, et al. Connection of silicon nanocrystals (Si-nc) with multi-walled carbon nanotubes[J]. *Appl.Phys.A*, 2006, 83: 153-157.
- [2] K. K. Hirakuri, T. Kurata, N. Mutsukura, et al. Field-emission properties of diamond grains grown on textured Fe/Si substrates [J]. *J.Appl.Phys.*, 2000, 87: 2026-2031.
- [3] Z. X. Liu, S. N. Wang, N. Otagawa, et al. A thin-film solar cell of high-quality  $\beta\text{-FeSi}_2/\text{Si}$  heterojunction prepared by sputtering[J]. *Sol.Energy.Mater.Sol.Cells*. 2006, 90: 276-282.
- [4] T. Suemasu, Y. Negishi, K. Takakura, et al. Room temperature 1.6 $\mu\text{m}$  electroluminescence from a Si-based light emitting diode with  $\beta\text{-FeSi}_2$  active region[J]. *Jpn.J.Appl.Phys.*, 2000, 39: L1013-L1015.
- [5] M. Miyao, K. Ueda, Y. Ando, et al. Atomically controlled hetero-epitaxy of  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{SiGe}$  for spintronics application[J]. *Thin Solid Films*, 2008, 517: 181-183.
- [6] M. Mohri, N. Yangisawa, Y. Tojima, et al. Rechargeable lithium battery based on pyrolytic carbon as a negative electrode[J]. *J.Power Sources*, 1989, 26: 545-551.
- [7] O. Schneeweiss, N. Pizurova, Y. Jiraskova, et al.  $\text{Fe}_3\text{Si}$  surface coating on SiFe steel[J]. *Sciences*, 2000, 215-216: 115-117.
- [8] J. H. Peng, G. L. Chen, Effect of testing environment on fracturing behavior of  $\text{Fe}_3\text{Si}$  based alloy[J]. *Acta metallurgica sinica(English letters)*, 2003, 16(2): 104-109.
- [9] M. Karen, V. Rossum, Properties of Metal Silicides[M]. London: Institution of Engineering and Technology, 1995.24.
- [10] J. Herfort, H. P. Schönherr, K. H. Ploog, Epitaxial growth of  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(001)$  hybrid structures[J]. *Appl.Phys.Lett.*, 2003, 83: 3912-3914.
- [11] A. Kawaharazuka, M. Ramsteiner, J. Herfort, et al. Spin injection from  $\text{Fe}_3\text{Si}$  into GaAs[J]. *Appl.Phys.Lett.*, 2004, 85: 3492-3494.
- [12] J. Waliszewski, L. Dobrzyński, A. Malinowski, et al. Magnetic moment distribution in  $\text{Fe}_{3-x}\text{Cr}_x\text{Si}$  alloys[J]. *J.Magn.Magn.Mater.*, 1994, 132: 349-358.
- [13] Burch T J, Litrenta T, Budnick J I, Hyperfine studies of site occupation in ternary systems[J].*Phys.Rev.Lett.*, 1974, 33: 421-424.
- [14] J. Kudrnovsky, N. E. Christensen, O. K. Andersen, Electronic structures and magnetic moments of  $\text{Fe}_{3-y}\text{Si}_{1-y}$  and  $\text{Fe}_{3-x}\text{V}_x\text{Si}$  alloys with  $\text{D}_{03}$ -derived structure[J]. *Phys.Rev.B.*, 1991, 43(7): 5924-5933.
- [15] J. I. Budnick, Zhengquan T, D. M. Pease, X-ray absorption studies of selective site substitution by 3d transition metals in  $\text{Fe}_3\text{Si}$ [J]. *Physica B*, 1989, 158: 31-33.
- [16] A. C. Switendick, A theoretical model for site preference of transition metal solutes in  $\text{Fe}_3\text{Si}$ [J]. *Solid State Commun.*, 1976, 19: 511-515.
- [17] A. R. Williams, V. L. Moruzzi, C. D. Gelatt, et al. Aspects of transition-metal magnetism[J]. *J.Appl.Phys.*, 1982, 52: 2019-2023.
- [18] J. Herfort, P. K. Muduli, K. J. Friedland, et al. Magnetic anisotropy in Heusler alloy  $\text{Fe}_3\text{Si}$  films on GaAs(113)A[J]. *J.Mag.Mag.Mater.*, 2007, 310: 2228-2230.
- [19] K. Lenz, E. Kosubek, K. Baberschke, et al. Magnetic properties of  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{GaAs}(001)$  hybrid structures[J].*Phys.Rev.B*, 2005, 72: 144411-144415.
- [20] T. J. Burch, J. I. Budnick, V. A. Niculescu, et al. Transition-metal impurities in dilute  $\text{Fe}_{3-x}\text{T}_x\text{Si}$  alloys: A spin-echo NMR investigation[J]. *Phys.Rev.B*, 1981, 24: 3866-3883.
- [21] S. Pickart, T. Litrenta, T. Burch, et al. Site preference of dilute transition metal solutes in  $\text{Fe}_3\text{Si}$ [J]. *Phys.Lett.A*, 1975, 53: 321-323.
- [22] C. Blaauw, G. R. Mackay, W. Leiper, Confirmation of selective site occupation of dilute Co impurities in  $\text{Fe}_3\text{Si}$  using the Mossbauer effect technique[J]. *Solid State Commun.*, 1976, 18: 729-730.
- [23] Y. Zhang, D. G. Ivey,  $\text{Fe}_3\text{Si}$  formation in Fe-Si diffusion couples[J]. *J.Mater.Sci.*, 1998, 33: 3131-3135.
- [24] M. B. Stearns, Spin-density oscillations in ferromagnetic alloys. I. "Localized" solute atoms: Al, Si, Mn, V and Cr in Fe[J]. *Phys. Rev.*, 1966, 147: 439-453.
- [25] H. Bakker, J. P. A. Westerveld, Expression for the diffusion coefficient in intermetallic compounds with Cubic structures[J]. *Phys.Status Solidi B*, 1988, 145: 409-417.
- [26] B. Sepiol, G. Vogl, Atomistic determination of diffusion mechanism on an ordered lattice[J]. *Phys.Rev.lett.*, 1993, 71(5): 731-734.
- [27] E. J. D. Garba, R. L. Jacobs, Electronic structure and site preference of transition-metal impurities in  $\text{Fe}_3\text{Si}$ [J]. *J. Phys. F. Met. Phys.*, 1986, 16: 1485-1494.
- [28] Y. Zhao, Q. Shen, C. B. Wang, et al. Phase changes in Fe-Si power mixtures by mechanical alloying and subsequent heat treatment[J]. *Key Eng. Mater.*, 2005, 280-283: 1709-1712.
- [29] G. L. Chen, J. H. Peng, W. X. Xu, Surface reaction of polycrystalline  $\text{Fe}_3\text{Si}$  alloys with oxygen and water vapor[J]. *Intermetallics*, 1998, 6: 315-322.
- [30] U. Kettner, H. Rehfeld, C. Engelke, et al. A comparison of the plastic behaviour of  $\text{Fe}_3\text{Al}$  and  $\text{Fe}_3\text{Si}$  in the temperature range of 300-973K[J]. *Intermetallics*, 1999, 7: 405-414.
- [31] H. Haiji, K. Okada, T. Hiratani, et al. Magnetic properties and work ability of 6.5%Si steel sheet[J]. *J. Mag. Mag. Mater.*, 1996, 160: 109-114.
- [32] C. G. Oertel, U. Kramer, K. Kleinstuck, High-temperature creep and structure investigation of nearly stoichiometric  $\text{Fe}_3\text{Si}$ [J]. *J. Mater. Sci.*, 1986, 21: 2585-2589.

- [33] P. V. Blanckenhagen, C. Lin, Magnetic short-range order and spin waves in  $\text{Fe}_3\text{Si}$  above the curie temperature[J]. *Physica B*, 1983, 120: 173-175.
- [34] F. Leoni, C. Natoli, Spin waves in ordered  $\text{Fe}_3\text{Si}$ ,  $\text{Fe}_3\text{Al}$  ferromagnetic alloys in the Heisenberg model, [J]. *Physica*, 1969, 40: 553-566.
- [35] K. Szymanski, L. Dobrzynski, R. Burzynska, Structural disorder in Fe-Si alloys near  $\text{Fe}_3\text{Si}$  composition[J]. *Hyperfine Interact.* , 1990, 59: 477-480.
- [36] E. J. D. Garba, R. L. Jacobs, Electronic structure and site preference of transition-metal impurities in  $\text{Fe}_3\text{Si}$ [J]. *J. Phys. F: Met. Phys.* 1986, 16:1485-1494.
- [37] I. N. Shabanova, V. A. Trapeznikov, A study of the electronic structure of  $\text{Fe}_3\text{C}$ ,  $\text{Fe}_3\text{Al}$  and  $\text{Fe}_3\text{Si}$  by X-ray photoelectron spectroscopy[J]. *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* , 1975, 6: 297-307.