

镍掺杂硅纳米线电子结构和光学性质的 第一性原理研究*

梁伟华 丁学成 褚立志 邓泽超 郭建新 吴转花 王英龙[†]

(河北大学物理科学与技术学院, 保定 071002)

(2010 年 1 月 6 日收到; 2010 年 2 月 27 日收到修改稿)

利用基于密度泛函理论的第一性原理计算, 对镍掺杂硅纳米线的结构稳定性、电子与光学性质进行了研究. 结果表明: Ni 容易占据硅纳米线表面的替代位置. 镍掺杂后的硅纳米线引入了杂质能级, 杂质能级主要来源于 Ni 的 3d 电子的贡献. 由于 Ni 的 3d 态和 Si 的 3p 态的耦合作用, 使禁带宽度变窄. 掺杂后的硅纳米线在低能区出现了一个较强的吸收峰, 且吸收带出现宽化现象.

关键词: 硅纳米线, 掺杂, 电子结构, 光学性质

PACC: 7280C, 7120H, 7115H, 7865K

1. 引 言

由于纳米硅材料在硅基光电子器件、全硅光电子集成技术以及太阳能电池中具有潜在的应用前景^[1], 从而引起人们广泛关注. 纳米硅材料具有硅纳米晶粒^[2-4]、硅纳米管^[5]、硅纳米线等微结构, 其中硅纳米线具有许多不同于其他低维半导体材料的新颖光电特性, 有望在场发射器件、光探测器件、纳米传感器和高效发光器件中发挥重要作用^[6-8]. 然而, 由于硅纳米线的量子限制效应, 导致禁带宽度增大^[9], 这对提高器件的工作速度是不利的. 通过掺杂既可以改变材料的导电特性和发光中心, 又可以利用杂质原子与硅原子具有不同的原子半径所产生的应变作用, 控制其生长模式和杂质浓度, 可获得特殊性能的硅材料, 为提高器件性能提供了新途径.

近年来, 人们对掺杂硅纳米线的各项性能研究取得了一定进展^[10], 且利用掺杂硅纳米线制备一些纳米电子器件^[11,12]. 最近有研究者将镍作为深能级杂质掺入硅中, 形成的镍硅合金纳米线具有很低的电阻率, 并且能和金属电极形成稳定的欧姆接

触^[13,14]. 这些实验研究为掺杂硅纳米线在光电子器件中的应用奠定了基础. 但影响掺杂硅纳米线电子器件应用的因素很多, 使实验条件达到所要求的标准难以控制. 尽管经过人们的长期努力已经获得了不少关于硅纳米线结构电子性质和发光特性的有用信息^[15-17], 但理论探讨掺杂对硅纳米线的电子结构和光学特性的影响还很初步.

目前, 基于密度泛函理论的第一性原理已经广泛应用于物理、化学、生物和医学等领域. 可以研究陶瓷、金属、半导体的多种性质, 如表面吸附性质^[18]、电子结构^[19]、磁性^[20]和光学性质^[21,22]等; 还成功的应用于纳米领域, 研究纳米线、纳米管及纳米束的多种性质^[23-25]. 在新材料的制备及物性研究中为实验提供了指导, 并且为许多实验结果做出合理的理论解释. 已有工作用第一性原理对掺杂硅纳米簇及硅块材的电子结构及磁性进行了研究^[26-28]. 人们还对一些非金属和金属掺杂硅纳米线进行了计算^[29-31], 结果表明掺杂后的硅纳米线的电子结构发生变化, 高浓度的掺杂硅纳米线 (Al, Ga, As) 具有金属性, 而掺杂硅纳米线 (C, Si, Ge, Te) 具有半导体性, 且带隙不同, 并发现 Mn 和 Fe 掺杂硅纳米线具有较大的局域性磁矩, 可作为硅基稀磁半导体纳米

* 国家自然科学基金 (批准号: 10774036), 河北省自然科学基金 (批准号: E2008000631), 河北省光电材料重点实验室和河北大学自然科学基金资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: hdwangyl@hbu.cn

线材料. 而镍掺杂硅纳米线的第一性原理研究还未见报道. 本文采用第一性原理计算了镍掺杂硅纳米线的形成能、电子结构和光学性质, 并对结果进行了详细的理论分析, 为硅纳米线材料的设计及应用提供理论依据.

2. 理论模型和计算方法

2.1. 理论模型

首先建立一个 $3 \times 3 \times 2$ 硅块材的超原胞, 通过移除硅材料相应超晶胞内不需要的原子, 构建了 (100) 方向硅纳米线 (SiNW) 结构, 且用氢终止表面硅原子的悬键, 晶胞内含有 50 个 Si 原子和 40 个 H 原子, 在晶胞的 x, y 方向加足够大的真空层, 相邻两根纳米线最外层原子间的距离至少为 0.5 nm, 这样可忽略相邻纳米线原子之间的相互作用, z 方向为周期性的一维结构, $x-y$ 截面是正方形结构, 截面表示为 $N \times N$ (N 为正方形边长上的硅原子个数), (100) 方向 (5×5) 硅纳米线的俯视图 (沿 z 方向) 如图 1 所示. 为了研究 Ni 掺杂位置对硅纳米线的电子结构和光学性质的影响, 我们分别用一个 Ni 原子替换硅纳米线中不同位置 (I, II, III, IV, V 和 VI) 的一个 Si 原子, 建立了 (100) 方向 (5×5) 镍掺杂硅纳米线 (Ni-SiNW).

2.2. 计算方法

本文的工作都是使用基于密度泛函理论的第一性原理的 CASTEP 软件包完成的. 选择超软 (ultrasoft) 赝势平面波法和 GGA/PBE 交换关联能, 平面波截止能 $E_{\text{cut}} = 300$ eV, 自洽收敛精度 2×10^{-5} eV/atom, 布里渊区 k 点网格数取 $1 \times 1 \times 6$, 原子间的相互作用力不超过 0.5 eV/nm, 晶体内部应力收敛标准为 0.1 GPa, 原子的最大位移收敛标准为 2.0×10^{-4} nm, 选取原子的价电子组态 Si:

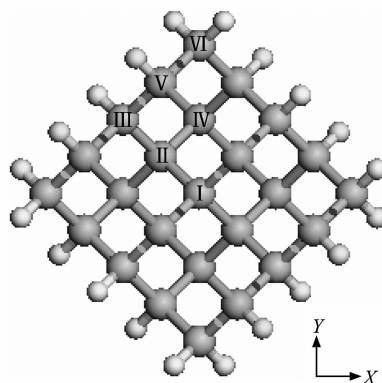


图 1 (100) 方向 (5×5) 硅纳米线结构图. 直径大的球为 Si, 直径小的球为 H

$3s^2 3p^2, \text{Ni}; 3d^8 4s^2$. 首先对晶胞进行内坐标优化, 然后再进行能带结构和态密度的计算. 选择 norm-conserving 赝势, 交换关联函数为 GGA/PBE, 取较高的截断能 600 eV, 来计算光学性质, 最后分析计算结果.

3. 计算结果与讨论

3.1. 几何优化结果和体系的稳定性

首先对 Ni-SiNWs 进行几何优化, 在优化结构时只对原子的坐标进行了优化, 因此优化前后晶格常数和体积不变. 晶格常数 $a = b = 1.629$ nm, $c = 1.086$ nm, 晶胞体积 $V = 2.883$ nm³, 优化后硅纳米线的 Si—Si 键长 = 0.236 nm, 硅纳米线直径 $\Phi = 1.090$ nm (硅纳米线直径是指对角线上硅原子间的最远距离). 掺杂原子与附近原子 (Si) 间键长及硅纳米线直径列于表 1 中.

从表 1 中可以看出, 掺杂明显改变 SiNWs 的结构, 最大的变化在 Ni 原子周围, Ni 原子移向内部, SiNWs 的直径发生改变, Ni-SiNWs 中 Si—Si 间的键长与 SiNW 中的 Si—Si 键相比变化很小, 而 Ni 与最

表 1 几何优化后镍掺杂硅纳米线的一些参数 (nm)

掺杂位置	I	II	III	IV	V	VI
d	0	0.235	0.384	0.384	0.450	0.543
Si—Si 键长	0.235—0.236	0.233—0.242	0.236	0.234—0.236	0.236—0.240	0.235—0.237
Si—Ni 键长	0.226—0.228	0.222—0.224	0.221—0.228	0.222—0.224	0.220—0.227	0.224—0.226
Φ_y	1.080	1.094	1.092	1.060	1.089	1.089
Φ_x	1.080	1.095	1.092	1.006	1.098	1.096

d 为掺杂位置与硅纳米线中心间的距离.

相邻的 Si 形成的 Ni—Si 键长与 SiNW 中的 Si—Si 键长(0.236 nm)相比普遍变短,不同位置 Ni—Si 键长变化量不同,内部位置 Ni 的 Ni—Si 键长变化量小,表面位置 Ni 的 Ni—Si 键长变化量大(如表 1 中的 III 和 V); Si—Ni—Si 键角与初始晶胞 Si—Si—Si 键角相比变化也很大.这是由于当用 Ni 替代 Si 时, Ni 的原子半径与 Si 的不同,内部与表面位置 Ni 的环境也不同,内部位置 Ni 周围都为 Si 原子,对称性高;表面位置 Ni 周围是 H 和 Si 原子,对称性低,会产生晶格缺陷、畸变,由于在 x - y 方向和 z 方向的畸变程度不同,导致硅材料的生长方向不同. Peng 等人^[32]采用 Ni 诱导的方法形成纳米线, Ni 与 Si 化合生成 NiSi₂ 后,使得其附近的 Si 原子产生位移,而晶态 Si 具有最低的结合能,位于 NiSi₂ 分解和化合轨迹附近的 Si 开始晶化.当 NiSi₂ 走过的轨迹足够长时,纳米 Si 颗粒将外延生长为纳米硅线.

为了分析 Ni-SiNWs 的稳定性,我们计算了 Ni 替换 SiNW 中不同位置的 Si(图 1 中 I 至 VI)体系的总能量.由于缺陷形成能决定杂质的溶解度,在给定生长条件下,高缺陷形成能对应低杂质的溶解度,因此需要分析其缺陷形成能 E_f ,定义镍掺杂硅纳米线体系的缺陷形成能 E_f 为

$$E_f = E(\text{Ni-SiNW}) - E(\text{SiNW}) - \mu_{\text{Ni}} + \mu_{\text{Si}}, \quad (1)$$

其中 $E(\text{SiNW})$ 与 $E(\text{Ni-SiNW})$ 分别为镍掺杂前后硅纳米线的总能量, μ_{Ni} 与 μ_{Si} 分别为两种原子的化学势(μ_{Ni} 由计算 Ni 块材的总能对原子数平均得到,而 μ_{Si} 则由计算未钝化的(5×5)硅纳米线的总能对原子数平均得到).镍掺杂位置(图 1 中 I—VI)从 SiNW 的中心向表面移动有两条路径,一是 I→II→III(记为路径①);二是 I→II→IV→V(记为路

径②),而 VI 是表面的另外一个位置.由(1)式计算出的不同位置 Ni-SiNWs 的形成能的结果如图 2 所示,从图中可以看出,当 Ni 按路径①分别取代 SiNW 中 I, II 和 III 位置的 Si 原子时,形成能随 d 的增大而逐渐降低, III 位置形成能最低;当 Ni 按路径②分别取代 SiNW 中 I, II, IV 和 V 位置 Si 原子时,形成能变化与路径①相似, V 位置形成能最低,这表明表面镍掺杂 SiNW 比内部掺杂稳定.然而对于不同的表面位置(如 III, V 和 VI), V 位置的形成能最低,即 Ni 原子替代(5×5)SiNW 的 V 位置的 Si 原子,更容易形成稳定的 Ni-SiNW.这是由于 SiNW 本身内部结构和表面结构不同,当 Ni 替换不同位置的硅原子时,其周围的环境不同,位于内部位置的镍原子与周围的四个硅原子以 sp^3 杂化轨道成四面体结构,对称性较高,形变小;而位于表面位置的镍原子周围的一或两个 Si 原子被 H 原子替代,由于 H 和 Si 原子的电负性不同,导致 Ni—Si, Ni—H 键长及 Si—Ni—Si, H—Ni—Si 键角变化大,对称性降低,结构形变大,这也可从结构优化结果中看出.而 SiNW 表面的形变程度与 SiNW 中原子发生位移的大小所需要的弹性能有关, SiNW 表面比内部有较高的形变能和低的化学能,仅当表面的形变能与 SiNW 变形的弹性能相均衡时才达到稳定的表面状态.通过以上分析得出结论:镍掺杂硅纳米线的稳定性不仅取决于掺杂位置,还与杂质周围的环境有很大的关系.

3.2. 镍掺杂硅纳米线的能带结构和态密度

为了便于分析掺杂对 SiNW 电子结构的影响,首先计算了(100)方向(5×5)SiNW 的能带结构,如图 3 所示(零点为费米能级),从图中可以看出,在第一布里渊区中的高对称 F 点,价带顶有最大值 0.00 eV,而在导带底有最小值 2.60 eV,因此 SiNW 是直接带隙半导体,其禁带宽度为 2.60 eV.这一结果比实际 SiNW 的禁带宽度要小.众所周知,由于密度泛函理论采用近似方法,会低估禁带宽度,通常需要修正,但是本文主要讨论掺杂对 SiNW 电子结构和光学性质的影响,因此不讨论禁带宽度的绝对大小.图 4 所示为硅纳米线的总态密度(TDOS)和分态密度(PDOS)图(虚线为费米能级),从图中可以看出,价带基本上分为两个区域,即能量在 -4.0—0 eV 之间的上价带区和能量在 -10.5—-4.0 eV 之间的下价带区.上价带主要是由 Si 的 3p 态电子

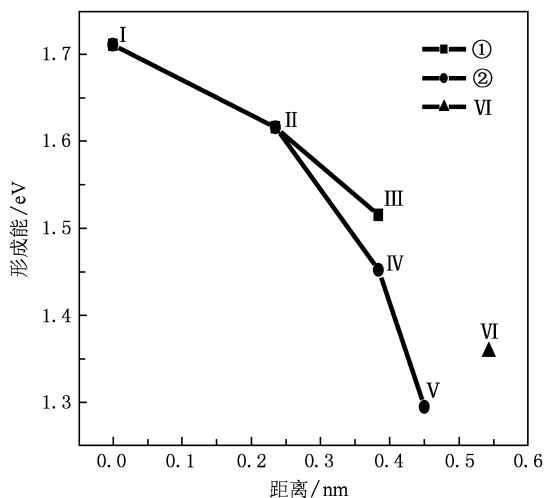


图 2 不同位置 Ni-SiNWs 的形成能

贡献的,而下价带主要是由 Si 的 3s 态电子贡献的;其导带主要来源于 Si 的 3p 态电子的贡献.

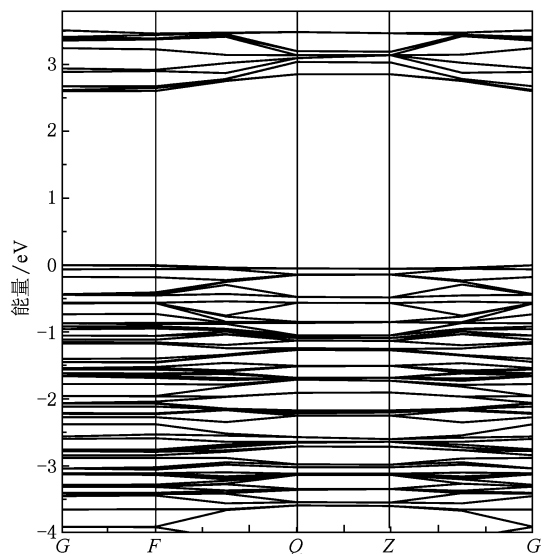


图 3 硅纳米线的能带结构图

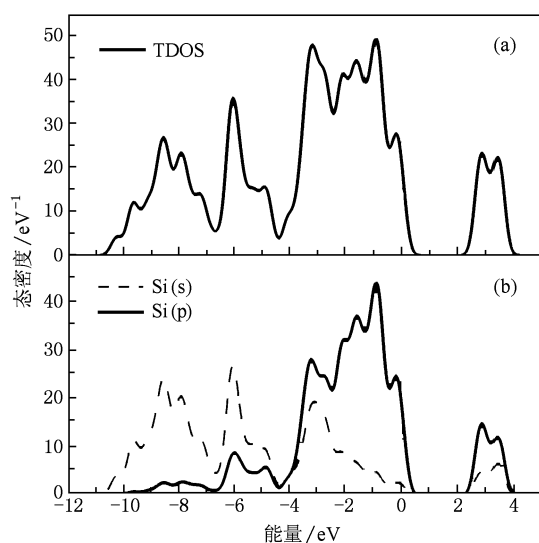


图 4 硅纳米线的态密度图 (a) TDOS; (b) PDOS

根据稳定性分析,选择了稳定的 V 位置的 Ni-SiNW 结构,计算了其能带结构和态密度. 图 5 所示为镍掺杂硅纳米线的能带结构图,从图中可以看出,镍掺杂没有改变 SiNW 的半导体性质,与 SiNW 的能带结构对比,价带顶有最大值 0.00 eV,导带发生下移,在带隙中引入了杂质能带,杂质能带与导带相连,其禁带宽度为 1.81 eV,与硅纳米线的禁带宽度(2.60 eV)相比较,带隙变窄. 图 6 (a) 和 (b) 是与 Ni-SiNW 能带结构相对应的总态密度(TDOS)和

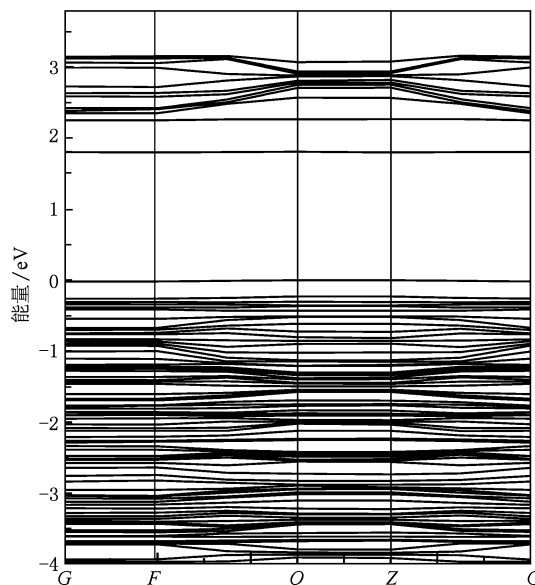


图 5 镍掺杂硅纳米线的能带结构图

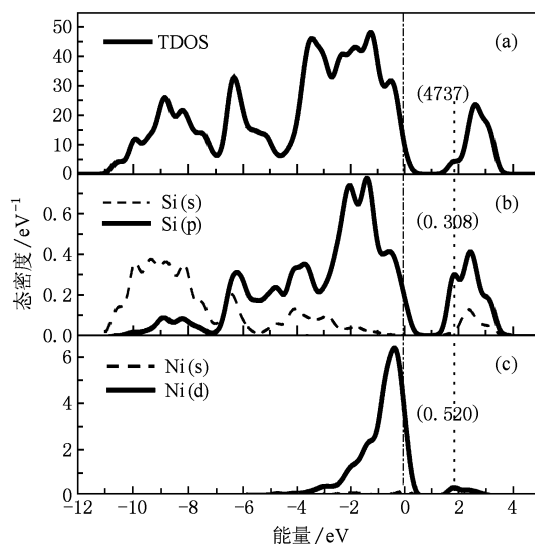


图 6 镍掺杂硅纳米线的态密度 (a) TDOS; (b) Si-PDOS; (c) Ni-PDOS

分态密度(PDOS)图. 从图中可知,上价态主要由 Si 的 3p 态电子和 Ni 的 3d 态电子的贡献的;其导带主要来源于 Si 的 3p 态电子的贡献;而带隙中杂质带的态密度主要来源于 Ni 的 3d 态电子和 Si 的 3p 态电子的贡献(图 6 中给出杂质带态密度的数值),这是由于 Ni 替代 Si 产生的 3d 电子恰在带隙中, Ni 的 3d 态电子与 Si 的 3p 态电子轨道重叠加剧,相互排斥作用减弱,使其总态密度增大,杂质带与导带相连,从而引起禁带宽度减小. 为了更好理解带隙变化,图 6 (c) 给出镍掺杂硅纳米线中 Ni 的 3d 态密度

图, 我们知道 Ni 原子的 3d 态的 5 个简并轨道由于电子的交换作用, 分为自旋向上和自旋向下, 在晶体场作用下可分别分裂成 2 个简并 e 轨道和 3 个简并 t_2 轨道, 由于 SiNW 在 xy 平面和 z 方向有不同的对称性, 使得 3 个 t_2 态轻微分裂成单态和双态, t_2 轨道与 Si 的 3p 轨道能级相近、对称性相同, 可以线性组合, 形成 3 个 t_2^b 成键轨道和 t_2^a 反键轨道, 这种 p-d 耦合作用, 使得被占据的 t_2^b 成键轨道位于价带内, 而 t_2^a 反键轨道位于 e 轨道之上, 能级降低, 导带下移. 对于 Ni 的 3d 轨道中的 2 个简并 e 态, 轨道未发生变化, 成为非键轨道, 定域性较强, 位于价带顶. 通过以上的讨论, 得出结论: 镍掺杂明显改变了硅纳米线的电子结构, 带隙变窄, 电阻率降低, 导电性增强, 因此镍掺杂是实现低阻材料的合适的掺杂元素. 这与文献[13]实验结果相一致.

3.3. 镍掺杂硅纳米线的光学性质

采用优化后的(100)方向 SiNW 和 V 位置掺杂后的 Ni-SiNW 的结构, 选择 norm-conserving 赝势计算了它们的光学性质. 由于光学介电函数反映固体能带结构和各种光谱信息, 因此我们分析 SiNW 和 Ni-SiNW 的介电函数 $\varepsilon(\omega)$, 而 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$, 实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 可通过 Kramer-Kronig 关系式推出, 介电函数的虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 与给定的 ω 的光吸收有关.

图 7(a), (b) 分别为 (100) 方向 SiNW 和 Ni-SiNW 介电函数的虚部. 从图中可知, SiNW 的介电函数的虚部, 在 4.51 eV 附近有强的介电峰; 镍掺杂硅纳米线在 4.44 eV 附近有强的介电峰, 与硅纳米线相比, 峰的位置向低能方向移动, 并在低能区 2.58 eV 附近出现了一个较强的介电峰, 其吸收边 (图 7 中的虚线) 向低能方向移动. 这一现象可由镍掺杂硅纳米线能带结构和态密度图得到解释, 带隙中的杂质带主要由 Ni 的 3d 电子贡献, 3d 轨道电子间的跃迁而产生的. 图 8 所示为镍掺杂硅纳米线的光吸收谱图, 从图 8(a) 可看出, 当光子能量约为 2.55 eV 时, 光吸收系数开始增大, 在 5.38 eV 附近有一强的吸收峰 (峰值为 9.03×10^4), 其后随着能量增大, 光吸收系数逐渐减小, 能量大于 7.46 eV 后吸收系数接近零, 吸收带宽为 4.91 eV (2.55—7.46 eV); 从图 8(b) 看出, 当能量约为 1.47 eV 时, 光吸收系数开始增大, 在低能区 2.60 eV 附近出现

的一个较强的吸收峰 (峰值为 1.56×10^4), 这是一个新的吸收峰, 随后在 5.28 eV 附近有一强的吸收峰 (峰值为 8.54×10^4), 与硅纳米线强吸收峰比对, 光吸收强度减弱, 能量再增大, 光吸收系数逐渐减小, 能量大于 7.41 eV 后吸收系数接近零, 吸收带宽为 5.94 eV (从 1.47—7.41 eV). 从以上分析可知, 镍掺杂明显改变了硅纳米线的光学性质, 由于掺杂使得硅纳米线在低能区的光吸收增强, 吸收带出现宽化现象.

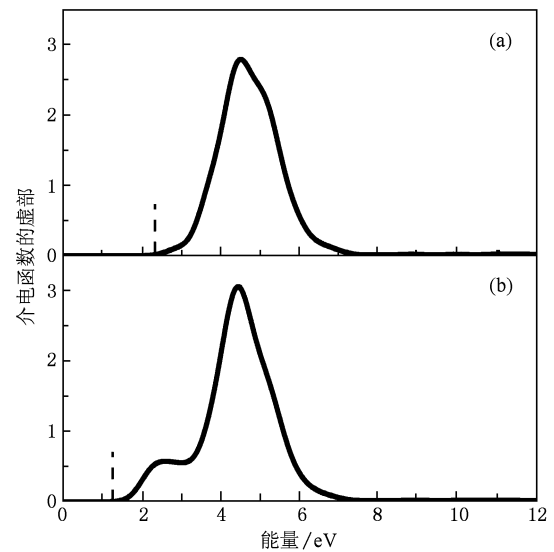


图 7 硅纳米线介电函数的虚部 (a) SiNW; (b) Ni-SiNW

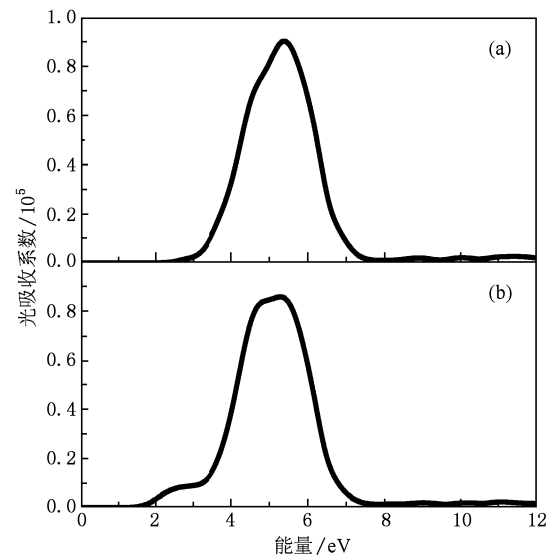


图 8 硅纳米线的光吸收谱 (a) SiNW; (b) Ni-SiNW

4. 结 论

利用基于密度泛函理论的第一性原理的方法, 计算了 Ni-SiNWs 的形成能、能带结构、态密度和光学性质, 结果发现: Ni-SiNWs 的稳定性与掺杂位置及杂质周围的环境有关, 表面掺杂硅纳米线的形成能较低, 比较稳定. 这主要是因为 Ni 周围的环境不同, 引起的形变有差异而造成的. 分析 Ni-SiNWs 的能带结构和态密度图得出, 相对于未掺杂 SiNW 而言, Ni-SiNWs 仍具有直接带隙半导体的性质, 在带

隙处产生了杂质带, 其态密度主要来源于 Ni 的 3d 态电子的贡献, 由于 Ni 的 3d 态与 Si 的 3p 态轨道耦合, 使得导带下移, 杂质带与导带相连, 禁带宽度变窄, 硅纳米线的电阻率降低, 导电性增强. 镍掺杂明显改变了硅纳米线的光学性质, 与 SiNW 相比较, 镍掺杂硅纳米线介电函数的虚部在低能区出现一个新峰; 其光吸收谱也表明掺杂后的硅纳米线, 在低能区出现较强的吸收峰, 且吸收带出现宽化现象. 可见, 在 SiNW 掺入过渡金属 Ni, 可以改变 SiNW 的电子结构和光学性质, 为 SiNW 在光电器件的应用研究提供了一定的理论基础.

- [1] Peng Y C, Zhao X W, Fu G S 2002 *Chinese Sci. Bull.* **47** 721 (in Chinese) [彭英才、赵新为、傅广生 2002 科学通报 **47** 721]
- [2] Wang Y L, Xu W, Zhou Y, Chu L Z, Fu G S 2007 *Laser Part. Beams* **25** 9
- [3] Fu G S, Wang Y L, Chu L Z, Zhou Y, Yu W, Han L, Peng Y C 2005 *Eur. Phys. Lett.* **69** 758
- [4] Wang Y L, Zhou Y, Chu L Z, Fu G S, Peng Y C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1683 (in Chinese) [王英龙、周 阳、褚立志、傅广生、彭英才 2005 物理学报 **54** 1683]
- [5] Tang Y H, Pei L Z, Chen Y W, Guo C 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 116102
- [6] Cui Y, Wei Q, Park H, Lieber C M 2001 *Science* **293** 1289
- [7] Hu S F, Wong W Z, Liu S S, Wu Y C, Sung C L, Huang T Y 2003 *Solid State Commun.* **125** 351
- [8] Bai Z G, Yu D P, Wang J J, Zou Y H, Qian W, Fu J S, Feng S Q, Xu J, You L P 2000 *Mater. Sci. Eng. B* **72** 117
- [9] Ma D D D, Lee C S, Au F C K, Tong S Y, Lee S T 2003 *Science* **299** 1874
- [10] Pei L Z, Tang Y H, Cheng Y W, Zhang Y 2004 *J. Funct. Mat. Dev.* **10** 399 (in Chinese) [裴立宅、唐元洪、陈扬文、张 勇 2004 功能材料与器件学报 **10** 399]
- [11] Lu M, Li M K, Kong L B, Gou X Y, Li H L 2003 *Chem. Phys. Lett.* **374** 542
- [12] Landman U, Barnett R N, Scherbakov A G, Avouris P 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 1958
- [13] Song Y, Andrew L S, Song J 2007 *Nano Letters* **7** 965
- [14] Wu Y, Xing J, Yang C, Lu W, Lieber C M 2004 *Nature* **430** 61
- [15] Zhai Z Y, Wu X S, Zhang W, Qian B, Zhang Y M, Zhang F M, Yan W S, Wang F, Gao C 2007 *Int. J. Mod. Phys. B* **21** 3469
- [16] Tang Y H, Sham T K, Jurgensen A, Hu Y F, Lee C S, Lee S T 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3709
- [17] Lan Anh T T, Yu S S, Ihm Y E, Kim D J, Hong S K, Kim C S 2009 *Physica B* **404** 1686
- [18] Li Q, Fan G H 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4170 (in Chinese) [李 琦、范广涵 2006 物理学报 **59** 4170]
- [19] Wang Y L, Wu Z H, Deng Z C, Chu L Z, Liu B T, Liang W H, Fu G S 2009 *Ferroelectrics* **386** 133
- [20] Li Q B, Li R Q, Zeng Y Z, Zhu Z Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 837 (in Chinese) [李秋宝、李仁全、曾永志、朱梓忠 2006 物理学报 **55** 837]
- [21] Guan L, Li Q, Zhao Q X, Guo J X, Zhou Y, Jin L T, Geng B, Liu B T 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5624 (in Chinese) [关 丽、李 强、赵庆勋、郭建新、周 阳、金利涛、耿 波、刘保享 2009 物理学报 **58** 5624]
- [22] Hou Q Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4156 (in Chinese) [侯清玉 2010 物理学报 **59** 4156]
- [23] Ni M, Luo G F, Lu J, Lai L, Wang L, Jing M W, Song W, Gao Z X, Li G P, Mei W N, Yu D P 2007 *Nanotechnology* **18** 505707(1-7)
- [24] Fagan S B, Baierle R J, Mota R, Do Silva A J R, Fazzio A 2000 *Phys. Rev. B* **61** 9994
- [25] Zhao X Y, Wei C M, Yang L, Chou M Y 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 236805
- [26] Long R, Dai Y, Huang B B, Sun X Q 2008 *Comput. Mater. Sci.* **42** 161
- [27] Zhang Z Z, Partoens B, Chang K, Peeters F M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 155201
- [28] Ma L, Zhao J J, Wang J G, Wang B L, Wang G H 2007 *Phys. Rev. B* **75** 045312
- [29] Giorgi G, Cartoixa X, Sgamellotti A, Rurali R 2008 *Phys. Rev. B* **78** 115327
- [30] Durgun E, Akman N, Ataca C, Ciraci S 2007 *Phys. Rev. B* **76** 245323
- [31] Xu Q, Li J B, Li S S, Xia J B 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 084307
- [32] Peng Y C, Fu G S, Yu W, Li S Q, Wang Y L 2004 *Simicond. Sci. Technol.* **19** 759

First-principles study of electronic and optical properties of Ni-doped silicon nanowires^{*}

Liang Wei-Hua Ding Xue-Cheng Chu Li-Zhi Deng Ze-Chao Guo Jian-Xin Wu Zhuan-Hua Wang Ying-Long[†]

(College of Physics Science and Technology, Hebei University, Baoding 071002, China)

(Received 6 January 2010; revised manuscript received 27 February 2010)

Abstract

Structural stability, electronic and optical properties of Ni-doped silicon nanowires are investigated by first-principles calculations based on the density functional theory. The results show that Ni can preferentially occupy substitutional sites near the surface of silicon nanowire. The doping of Ni atom in silicon nanowire introduces the impurity levels. The impurity level is mainly contributed by Ni 3d orbital. The decrease of the band gap results from the coupling of Ni 3d and Si 3p states. A strong absorption peak occurs in the low energy region of Ni-doped silicon nanowire, accompanied by the widening of the absorption band.

Keywords: silicon nanowires, doping, electronic structure, optical properties

PACC: 7280C, 7120H, 7115H, 7865K

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774036), the Natural Science Foundation of Hebei Province (Grant No. E2008000631), the Key Laboratory of Optical and Electronic Material of Hebei Province and the Natural Science foundation of Hebei University.

[†] Corresponding author. E-mail: hdwangyl@hbu.cn