



### V掺杂CrSi<sub>2</sub>能带结构的第1性原理计算

周士芸<sup>1</sup>, 谢泉<sup>2</sup>, 闫万珺<sup>1</sup>, 陈茜<sup>2</sup>

1. 贵州安顺学院物理系, 贵州安顺 561000;
2. 贵州大学电子科学与信息技术学院, 贵州贵阳 550025

### First-Principles calculation of the band structure of V-doped CrSi<sub>2</sub>

ZHOU Shi-yun<sup>1</sup>, XIE Quan<sup>2</sup>, YAN Wan-jun<sup>1</sup>, CHEN Qian<sup>2</sup>

1. Department of Physics, Anshun College, Anshun 561000, China;
2. College of Electronic Science & Information Technology, Guizhou University, Guiyang 550025, China

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章

全文: PDF (511 KB) HTML (1 KB) 输出: BibTeX | EndNote (RIS) 背景资料

**摘要** 采用基于第1性原理的密度泛函理论(DFT)赝势平面波方法和广义梯度近似,计算了V掺杂CrSi<sub>2</sub>体系的能带结构和态密度,计算结果表明,本体CrSi<sub>2</sub>是具有 $\Delta E_g=0.35\text{eV}$ 狭窄能隙的间接带隙半导体,其费米面附近的态密度主要由Cr的3d层电子和Si的3p层电子的态密度决定;V替代Cr掺杂后,费米能级进入价带,费米面插在价带的中间,带隙变窄,且间接带隙宽度 $\Delta E_g=0.25\text{eV}$ ;掺杂后费米面附近的电子态密度则由Cr的3d层电子、V的3d层电子和Si的3p层电子的态密度共同决定,掺杂后V原子成为受主,在价带顶附近贡献了一定数量的空穴,使掺杂后CrSi<sub>2</sub>的导电类型变为p型,提高了材料的电导率.

**关键词:** 半导体材料 CrSi<sub>2</sub> 掺杂 能带结构 第1性原理

**Abstract:** The energy band structures and density of states of intrinsic CrSi<sub>2</sub> and V-doped CrSi<sub>2</sub> have been calculated using the first-principles pseudo-potential method based on density functional theory(DFT) with generalized gradient approximation(GGA).The calculated results show that CrSi<sub>2</sub> is an indirect transition semiconductor with its narrow energy gap of 0.35eV;the density of state near the Fermi surface is mainly composed of Cr 3d and Si 3p state electron.After doping V,the Fermi level enters valence band,the width narrows with the indirect band gap width  $\Delta E_g=0.25\text{eV}$ .The density of state near the Fermi surface is mainly composed of Cr 3d,Si 3p and V 3d state electron.Atom V becomes the acceptor to contribute some holes at the top of valence band and CrSi<sub>2</sub> change into p-type semiconductor and improves the electrical conductivity of material.

**Key words:**

收稿日期: 2009-02-18;

引用本文:

周士芸,谢泉,闫万珺等. V掺杂CrSi<sub>2</sub>能带结构的第1性原理计算[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2009, 31(5): 484-488 .

\$author.xingMing\_EN,\$author.xingMing\_EN,\$author.xingMing\_EN et al. First-Principles calculation of the band structure of V-doped CrSi<sub>2</sub>[J]. , 2009, 31(5): 484-488 .

没有本文参考文献

- [1] 何飞刚. Nd(OH)<sub>3</sub>-Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>纳米复合掺杂和传统复合掺杂BaTiO<sub>3</sub>基陶瓷性能的对比研究[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2011, 33(4): 434-438 .
- [2] 刘永梅 刘守庆 梁坤. Y<sup>3+</sup>掺杂LiV<sub>3</sub>O<sub>8</sub>正极材料电化学性能研究[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2011, 33(4): 439-444, .
- [3] 晏翠琼 陶昌 陈光学 张桂琴. Fe<sup>3+</sup>,Ce<sup>3+</sup>共掺杂纳米TiO<sub>2</sub>的制备及其光催化性能[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2010, 32(4): 429-432, .
- [4] 晏翠琼 陈光学 陶昌 张桂琴. 钒掺杂TiO<sub>2</sub>纳米粉体光催化降解甲基橙研究[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2010, 32(1): 48-51 .

#### 服务

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ E-mail Alert
- ▶ RSS

#### 作者相关文章

- ▶ 周士芸
- ▶ 谢泉
- ▶ 闫万珺
- ▶ 陈茜

版权所有 © 《云南大学学报(自然科学版)》编辑部

编辑出版：云南大学学报编辑部（昆明市翠湖北路2号，650091）

电话：0871-5033829(传真) 5031498 5031662 E-mail: yndxxb@ynu.edu.cn yndxxb@163.com