

N/F掺杂和N-F双掺杂锐钛矿相TiO₂(101)表面电子结构的第一性原理计算

陈琦丽 唐超群

华中科技大学物理系, 武汉 430074

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)平面波赝势方法计算了N/F掺杂和N-F双掺杂锐钛矿相TiO₂(101)表面的电子结构. 由于DFT方法存在对过渡金属氧化物带隙能的计算结果总是与实际值严重偏离的缺陷, 本文也采用DFT+U(Hubbard 系数)方法对模型电子结构进行了计算. DFT的计算结果表明N掺杂后, N 2p轨道与O 2p和Ti 3d价带轨道的混合会导致TiO₂带隙能的降低, 而F掺杂以及氧空位的引入对材料的电子结构没有明显的影响. DFT+U的计算却给出截然不同的结果, N掺杂并没有导致带隙能的降低, 而只是在带隙中引入一个孤立的杂质能级, 反而F掺杂以及氧空位的引入带来明显的带隙能降低. DFT+U的计算结果与一些实验测量结果能够较好地符合.

关键词: 锐钛矿相TiO₂(101)表面 N/F掺杂 第一性原理计算 电子结构

收稿日期 2008-12-03 修回日期 2009-02-07 网络版发布日期 2009-03-18

通讯作者: 唐超群 Email: cqtang@public.wh.hb.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(738KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友
加入我的书架
加入引用管理器
引用本文
Email Alert
文章反馈
浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 锐钛矿相TiO₂(101)表面
▶ N/F掺杂
▶ 第一性原理计算
▶ 电子结构

本文作者相关文章

▶ 陈琦丽
▶ 唐超群