

SnO₂(110)弛豫表面构型与电子结构的第一性原理研究

林伟; 章永凡; 李奕; 陈勇; 李俊箴

福州大学化学系, 福州 350002; 中国科学院福建物质结构研究所, 结构化学国家重点实验室, 福州 350002

摘要:

采用基于第一性原理的密度泛函方法对SnO₂(110)表面的构型和电子结构进行了系统研究. 结果表明, 与理想表面相比, 表面弛豫导致表层五配位Sn原子向体相方向位移, 六配位Sn原子以及表面氧原子往真空方向移动, 而桥氧原子位置基本保持不变. 当表面厚度小于3 nm时, 表面能和表层原子的弛豫大小随着层数的增加出现振荡现象. 由能带计算结果得知, 以桥氧的2p_y/2i>p_z轨道为主要成分的能带出现在体相的带隙中. 进一步考察了弛豫对表面电子结构的影响.

关键词: 二氧化锡 表面弛豫 能带结构 密度泛函理论 表面态

收稿日期 2005-06-21 修回日期 2005-08-31 网络版发布日期 2006-01-15

通讯作者: 章永凡 Email: zhangyf@fzu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 方丽梅;李志杰;刘春明;祖小涛.水热法制备Fe³⁺改性的SnO₂纳米颗粒[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1212-1216
2. 刘向阳;张忠锁;张兴堂;程轲;黄亚彬;王德军;杜祖亮.1,4-双二茂铁噻吩/纳米二氧化锡异质结光伏性质研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1167-1171
3. 马若彪 付延鲍 马晓华.二氧化锡填充多壁碳纳米管材料的制备及电化学性能[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 441-445
4. 古风才;赵竹萱;李英慧;门娟;严菊明;刘瑞贤;张丽华.表面修饰二氧化锡纳米微晶的制备与表征[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 621-625
5. 赵海军;候海涛;曹洁明;郑明波;刘劲松;张防.溶剂热合成具有海绵状结构的介孔SnO₂[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 959-963
6. 周长军;朱月香;谢有畅.甲烷催化燃烧催化剂Ag/SnO₂体系的研究 [J]. 物理化学学报, 2001,17(09): 850-854
7. 周宏伟;李怀祥;姜正伟;左相青.利用SnO₂:Sb干凝胶部分升华产物处理ZnS:Mn荧光粉[J]. 物理化学学报, 2007,23(01): 88-91

扩展功能

本文信息

PDF(1250KB)

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

▶ 二氧化锡

▶ 表面弛豫

▶ 能带结构

▶ 密度泛函理论

▶ 表面态

本文作者相关文章

▶ 林伟

▶ 章永凡

▶ 李奕

▶ 陈勇

▶ 李俊箴