

不同SnO₂晶体结构的力学性能及电子结构

杜晔平; 陈敬超; 冯晶

昆明理工大学, 稀贵及有色金属先进材料教育部重点实验室及云南省新材料制备与加工重点实验室, 昆明 650093

摘要:

采用基于密度泛函理论(DFT)的平面波超软赝势法, 用广义梯度近似(GGA)PBE交换相关泛函, 对高压相变产生五种不同SnO₂晶体结构的电子结构和力学性质进行了第一性原理计算. 计算结果表明, Pnam型SnO₂的形成相对困难, 体模量较大, Pbca和Pnam型SnO₂的维氏硬度值相差不明显. 不同晶体结构的带隙存在差异, 导带区域电子分布和弥散程度大于价带区域, 局域性差. 五种SnO₂晶体结构的价带部分约在-10 - 0 eV和-20 - -15 eV处, 主要贡献来自于O 2p、2s轨道. 光学性质计算表明, Pnam结构对紫外波段光的吸收最明显, 同时给出电子轨道跃迁规律.

关键词: 氧化锡 压强 第一性原理 光学性质

收稿日期 2008-09-08 修回日期 2008-10-17 网络版发布日期 2008-12-04

通讯作者: 陈敬超 Email: chenjingchao@kmust.edu.cn; dyp2009@163.com

本刊中的类似文章

1. 吴雄, 苏克和. 氧化锡表面的原子簇模型计算[J]. 物理化学学报, 1996, 12(04): 357-360
2. 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
3. 林伟; 章永凡; 李奕; 陈勇; 李俊箴. SnO₂ (110)弛豫表面构型与电子结构的第一性原理研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(01): 76-81
4. 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
5. 庞旭, 马正青, 左列. Sn掺杂二氧化锰超级电容器电极材料[J]. 物理化学学报, 2009, 25(12): 2433-2437
6. 刘晓磊; 何建平; 党王娟; 计亚军; 赵桂网; 张传香. 介孔SnO₂的结构表征及其湿敏性能[J]. 物理化学学报, 2008, 24(03): 475-480
7. 王剑华; 李斌; 吴海燕; 郭玉忠. 介孔氧化锡的制备及其在锂离子电池中的应用[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 681-685
8. 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
9. 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
10. 赵海军; 侯海涛; 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
11. 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
12. 周长军; 林伟; 朱月香; 谢有畅. 氧化锡基甲烷催化燃烧催化剂的硫中毒反应机理[J]. 物理化学学报, 2003, 19(03): 246-250
13. 刘星辉; 唐东升; 曾春来; 海阔; 解思深. 化学气相沉积法制备氧化锡自组装纳米结构[J]. 物理化学学报, 2007, 23(03): 361-366
14. 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(4034KB)

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

▶ 氧化锡

▶ 压强

▶ 第一性原理

▶ 光学性质

本文作者相关文章

▶ 杜晔平

▶ 陈敬超

▶ 冯晶