

量子化学及计算化学

Sn<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>O<sub>2</sub>固溶体电极的形成能与电子结构

梁镇海, 丁永波, 樊彩梅, 郝晓刚, 韩培德

太原理工大学化学化工学院, 太原 030024; 太原理工大学材料科学与工程学院, 太原 030024

摘要:

为研究Sb掺杂对Ti/SnO<sub>2</sub>电极稳定性与导电性的影响, 采用基于密度泛函理论的平面波赝势方法对金红石型SnO<sub>2</sub>及不同比例Sb掺杂SnO<sub>2</sub>体系进行了第一性原理计算, 用广义梯度近似方法优化了Sn<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>O<sub>2</sub>固溶体电极的晶体结构, 计算了掺杂前后体系的电子结构以及不同掺杂比例时的形成能. 结果表明: Sb替代Sn后, 晶格常数与晶胞体积均增加, 但掺杂形成能随掺杂量变化不大, 在掺杂量为0.083时掺杂形成能达到最低值5.08 eV, 稳定性最好. 掺杂Sb后, 在费米能级至最低导带处存在Sb 5s电子态分布, 产生施主能级; 同时Sb掺杂后, 在导带底形成的可填充电子数也从未掺杂的4增加到了掺杂后的19, 导电性明显增强, 且在掺杂量为0.063时导电性最强. 本文的计算结果为钛基Sn<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>O<sub>2</sub>氧化物电极的开发与应用提供了理论依据.

关键词: 电子结构 Sb掺杂SnO<sub>2</sub> 第一性原理 形成能

收稿日期 2009-11-30 修回日期 2010-01-01 网络版发布日期 2010-01-26

通讯作者: 梁镇海 Email: liangzhenhai@tyut.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 崔明侠;董士红;王文亮;尹世伟;吕剑. 4-(1,2-二苯基)乙烯基-4'-(N,N-二苯基-4-乙基苯胺基)联苯及其二氟取代衍生物的电子结构与光谱性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 347-352
2. 史鸿运,王一波,邓洁,张云黔,张涛. 沙蚕毒系化合物的结构与生物活性关系[J]. 物理化学学报, 1995,11(12): 1089-1092
3. 曹泽星,黄宏新,田安民. O<sub>3</sub><sup>-</sup>激发态电子结构及内部电荷转移理论研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 97-101
4. 陈学安,赵凌,李言,陈本明,傅亨. C<sub>2</sub>近邻环境对金属碳化物电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 1996,12(03): 245-251
5. 胡云玩;钱惠琴;陈桥;毛宏颖;宋飞;黄寒;李海洋;何丕模;鲍世宁. Fluorescein有机薄膜在Ag(110)面上的生长研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 470-474
6. 崔万秋;雷鸣. TiC、TiC<sub>1-x</sub>、(Ti<sub>1-x</sub>Nb<sub>x</sub>)C电子结构的计算[J]. 物理化学学报, 1998,14(03): 198-203
7. 赵良仲;刘芬;张琳. LnCu<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (Ln=Gd,Nd)电子结构的XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2001,17(04): 310-313
8. 武晓君;李群祥;黄静;杨金龙. 单分子器件电子输运性质的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 995-1002
9. 殷元骐, 李文, 汪汉卿. 簇合物Co<sub>6</sub>(μ<sub>3</sub>-E)<sub>8</sub>(CO)<sub>6</sub> (E: -S, -Se)的电子结构及相关性能探讨[J]. 物理化学学报, 1995,11(02): 151-156
10. 杨胜勇;肖慎修;陈天朗. (NiV<sub>13</sub>O<sub>38</sub>)<sup>7-</sup>的电子结构和催化性质的探讨[J]. 物理化学学报, 1994,10(12): 1071-1074
11. 周传华;李奇;黄元河;刘若庄. 聚噻吩取代效应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(09): 825-829
12. 李荣;周上祺;陈昌国;梁国明;刘守平;孔纪兰. 钒氢化物电子结构的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(07): 716-720
13. 黄寒;严欣激;毛宏颖;陈桥;钱惠琴;张建华;李海洋;何丕模;鲍世宁. 银(110)表面花有序薄膜电子态的研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 892-896
14. 罗文华;蒙大桥;李赣;陈虎翅. Pu<sub>3</sub>M和PuM<sub>3</sub> (M=Ga, In, Sn, Ge)化合物的电子结构和形成热[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 388-392
15. 苗月;袁宏宽;陈洪. 双钙钛矿Sr<sub>2-x</sub>La<sub>x</sub>CrReO<sub>6</sub>的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 448-452
16. 梁初;黎光旭;蓝志强;刘奕新;韦文楼;郭进. LiAlH<sub>4</sub>与Li<sub>3</sub>AlH<sub>6</sub>的成键特性及热力学稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 686-690
17. 孙慧卿;丁少锋;王雨田;邓贝;范广涵. CdO及Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O化合物的结构、能量和电子性能分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1233-1238

扩展功能

本文信息

PDF(1588KB)

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

▶ 电子结构

▶ Sb掺杂SnO<sub>2</sub>

▶ 第一性原理

▶ 形成能

本文作者相关文章

▶ 梁镇海

▶ 丁永波

▶ 樊彩梅

▶ 郝晓刚

▶ 韩培德

18. 罗世霞;张笑一;张思亭;朱淮武;胡继伟;卫钢. 巯基偶氮苯单分子电子传输的取代基效应[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1471-1476
19. 张华;陈小华;张振华;邱明. 接枝羟基对有限长碳纳米管电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1101-1105
20. 吕海港;黎乐民. 表观价态异常分子EuS<sub>2</sub>和Eu<sub>2</sub>S的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
21. 胡亚兰;黄锋;蒋辉;范崇旭;陈常英;陈冀胜.  $\alpha$ -芋螺毒素构效关系与分子设计[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 474-478
22. 杨兵;张海全;许海;郑岩;于景生;马於光;沈家骢. 间位聚苯及其衍生物的构象与电子结构的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1476-1480
23. 陈琦丽 唐超群. N/F掺杂和N-F双掺杂锐钛矿相TiO<sub>2</sub>(101)表面电子结构的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 915-920
24. 赵庆勋;耿波;王书彪;边芳;关丽;刘保亭. 氢对PbZr<sub>0.5</sub>Ti<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub>在氮氢混合气氛退火中铁电性能的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 183-186
25. 张材荣;吴有智;陈玉红;陈宏善. 有机染料敏化剂JK16和JK17的几何结构、电子结构及相关性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 53-60
26. 杜晔平;陈敬超;冯晶. 不同SnO<sub>2</sub>晶体结构的力学性能及电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 278-284
27. 李葵英;郭静;刘通;周冰晶;李悦. 掺镧多孔TiO<sub>2</sub>纳米晶表面电子结构与能量转换机制[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2096-2101
28. 李来才;王译伟;田安民. 甲醇在Pt-Mo(111)/C表面上的吸附[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2013-2018
29. 李宗宝;姚凯伦;刘祖黎. 有机-无机杂化化合物[Cu( $\mu$ -cbdca)(H<sub>2</sub>O)]<sub>n</sub>的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
30. 张丽敏;范广涵;丁少锋. Mg、Zn掺杂AlN电子结构的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1498-1502
31. 葛丽;惠希东;陈国良;LIU Zi-Kui. Cu-Zr二元系非晶合金的玻璃形成能力预测[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 895-899
32. 吴广新;张捷宇;吴永全;李谦;周国治;包新华. H在Mg(0001)表面吸附、解离和扩散的第一性原理研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 55-60
33. 陈琨;范广涵;章勇;丁少锋. N掺杂p-型ZnO的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 61-66
34. 欧阳方平;徐慧;李明君;肖金. Armchair型石墨纳米带的电子结构和输运性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 328-332
35. 胡海泉;李恒帅;崔守鑫;王文军. Fe/Cr超晶格的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 846-850
36. 李思殿;郭巧凌;苗常青;任光明. 含平面配位碳的过渡金属烃配合物M<sub>n</sub>H<sub>n</sub>C密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
37. 张建华;庄友谊;吴悦;鲍世宁;刘凤琴;奎热西·易卜拉欣;钱海杰. 己烯在Ru(1010)表面价带电子特性研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 437-440
38. 杨刚;龙翔云;杨高文;曾小君. 二苯并四氮杂[14]轮烯金属配合物电子结构和性质 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 100-105
39. 于海涛;池玉娟;傅宏刚;黄旭日;孙家锤. HBO<sub>2</sub>异构体的结构和相对稳定性[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 87-90
40. 施申蕾;楼辉;张建华;吕萍;江宁;何丕模;鲍世宁. COT-H在金属Ru表面上沉积的光电子能谱分析[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 30-33
41. 吴卫东;张占文;罗江山;唐永建;郑永铭;陆晓明;赵鹏骥. Cu<sub>x</sub>C<sub>60</sub>薄膜紫外-可见吸收光谱研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(01): 83-86
42. 陈常英;丁晓琴;冯珊. 西加毒素(CTX)的电子结构及构效关系研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(04): 307-311
43. 徐国亮. 原子个数n对碳分子线C<sub>n</sub>(n=3~10)基态结构特性的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 701-705
44. 郑康成;陈忠宁;黄加多;刘汉钦. 草酰胺桥联双核铜配合物结构单元的从头算[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 204-209
45. 李文;张瑞林;余瑞璜. Ti-Al系金属间化合物的价电子结构分析[J]. 物理化学学报, 1999,15(09): 824-829
46. 张琳;赵良仲;张金彪;徐翠英;刘世宏. BaK<sub>2</sub>PbO和BaK<sub>2</sub>PbBiO的熔盐阳极电结晶[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 1049-1052
47. 邱丽美;刘芬;赵良仲. K-Pb-Tl-O复合氧化物的合成和电子结构的XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(07): 633-635
48. 董南;朱龙观;吴念慈. La(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·bipy·2H<sub>2</sub>O·(B-15-C-5)电子结构和电化学键[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 252-255

49. 黎乐民.  $[\text{Nd}(\text{SSCNH}_2)_4]^-$  的电子结构——一种有机硫配位镧系络合物的模型阴离子[J]. 物理化学学报, 1992,8(01): 10-17
50. 李丽; 吴锋; 陈实; 陈人杰.  $\text{LaNi}_{5-x}\text{Co}_x$  合金电子结构的第一性原理分析[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1331-1336
51. 倪敏; 贺黎明; 金乾元; 刘洪霖. 非晶态Co-B的局域电子结构的 $X_{\text{q}}$ 原子簇计算[J]. 物理化学学报, 1992,8(04): 550-554
52. 刘光华; 黎乐民; 徐光亮; 梁珍璇. 五配位双核铁簇合物的电子结构研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(01): 64-71
53. 叶元杰. 蛋白质的电子结构与活性关系——理论与计算方法[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 257-259
54. 陈学安; 傅亨; 唐有祺; 朱敏慧; 徐江. 结构调制对 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$  电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 1991,7(04): 396-399
55. 贾建峰; 武海顺. BN纳米管内含C纳米管——结构与电学性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1520-1525
56. 田蒙奎; 蒋丽; 上官文峰; 王世杰; 欧阳自远. 可见光响应光催化剂 $\text{K}_4\text{Ce}_2\text{Ta}_{10}\text{O}_{30}$ 、 $\text{K}_4\text{Ce}_2\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$  及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 466-472
57. 张子英, 杨德林, 刘云虎, 曹海滨, 邵建新, 井群.  $\text{BaTiO}_3$  的电子结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1731-1736
58. 贡江妮, 张志勇. In、Sc掺杂对 $\text{SrTiO}_3$  电子结构和光学性质的影响[J]. 物理化学学报, 2010,26(03): 751-757
59. 曹青松, 邓开明.  $\text{C}_{56}\text{X}_{10}$  (X=F, Cl, Br, I) 的结构稳定性和电子性质[J]. 物理化学学报, 2010,26(02): 461-465
60. 刘建才, 张新明, 陈明安, 唐建国, 刘胜胆. 含Pb铝合金表面的电化学溶解趋势[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 163-168
61. 李玉琼, 陈建华, 陈晔. 空位缺陷黄铁矿的电子结构及其浮选行为[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
62. 蒋鸿. GW方法: 基本原理, 最新进展及其在 $d$ -和 $f$ -电子体系中的应用[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0