

薄膜光学

Sb掺杂对透明SnO₂薄膜导电性能影响的第一性原理计算

邓周虎¹; 闫军锋²; 张富春²; 王雪文²; 徐建平²; 张志勇²

西北大学 信息科学与技术学院, 西安 710069¹

收稿日期 2007-3-22 修回日期 2007-3-30 网络版发布日期 2007-8-15 接受日期

摘要 本文根据密度泛函理论(DFT), 采用第一性原理平面波赝势方法, 计算了Sb掺杂对透明导电薄膜SnO₂电子结构及导电性能的影响, 讨论了掺杂下SnO₂晶体的结构变化、能带结构、电子态密度. 计算结果表明, Sb掺杂的SnO₂具有高的电导率, 且随着掺杂浓度的增加, 能带简并化加剧, 浅施主杂质能级向远离导带底方向移动.

关键词 [SnO₂](#) [第一性原理](#) [电子结构](#) [掺杂](#)

分类号 [TN304.2](#)

通讯作者 邓周虎 dengzh@nwu.edu.cn

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(465KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

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](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“SnO₂”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [邓周虎](#)
- [闫军锋](#)
- [张富春](#)
- [王雪文](#)
- [徐建平](#)
- [张志勇](#)