

Al 掺杂 SnO₂ 材料电子结构和光学性质*于峰 王培吉[†] 张昌文

(济南大学理学院, 济南 250022)

(2010年4月21日收到; 2010年5月27日收到修改稿)

采用基于第一性原理的线性缀加平面波方法(FP-LAPW), 研究 Al 掺杂 SnO₂ 材料 Sn_{1-x}Al_xO₂ ($x = 0, 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$) 的电子结构和光学性质, 包括能带结构、电子态密度、介电函数和其他一些光学性质. 计算结果表明, 掺杂 Al 之后价带部分折叠态增加, 价带宽度发生收缩, 对导带底起作用的 Sn 5s 态减少, 使得带隙增宽, 且态密度整体向高能方向发生移动. 随着 Al 掺杂量的增加带隙越来越宽, Al 杂质能级在导带部分与 Sn 5p 态电子相互作用逐渐增强, 虚部谱中的第一介电峰的强度随掺杂 Al 浓度增大而减弱. 同时, 吸收谱及其他光学谱线与介电函数虚部谱线相对应, 各谱线均发生蓝移现象, 对应带隙增宽, 从理论上指出了光学性质与电子结构之间的内在关系.

关键词: 能带结构, 态密度, 光学性质, 介电函数

PACS: 31.15.A-, 71.15.Dx, 71.15.Mb

1. 引言

金红石结构 SnO₂ 属 IV-VI 族宽禁带半导体材料, 是一种新型的透明导电氧化物(TCO), SnO₂ 带隙 E_g 宽为 3.6 eV, 比 ZnO 还宽(ZnO 的带隙为 3.36 eV), 激子束缚能高达 130 meV. 高激子束缚能使得 SnO₂ 基半导体材料具有更大的发展潜力, 广泛用于太阳能电池、有机半导体仪器中的有效电极、平板显示、传感器等领域^[1-3]. 目前, 人们关于 SnO₂ 材料已涉及材料的磁性^[4]、电子结构^[5-7]、氧化和还原表面结构^[8,9] 以及改变材料电导率^[10,11] 方面的理论和实验研究. Wang 等^[4] 应用第一性原理分析了 Co 掺杂 SnO₂ 的磁机制; Errico^[6] 利用第一性原理分析了 SnO 和 SnO₂ 的结构与性能; 徐剑等^[12] 研究了 F 掺杂 SnO₂ 电子结构、能带结构和态密度, 分析了掺杂对晶体性质和光学吸收边的影响; Zhang 等^[13] 研究了 Al 及其他金属元素在 SnO₂ 掺杂中的磁性起源问题, 发现空穴掺杂引入的杂质态主要来自自旋向下态密度(DOS)上的价带边缘. 然而, 关于 Al 掺杂 SnO₂ 材料的光学性质研究却相对较少, 实验证明 SnO₂ 掺杂 Al 具有很好的稳定性^[14]. 利用第一性原理在材料的光电性能与磁学性能计算方面均取得了较好的结果, Zuo 等^[15-17] 利用第一性原理计算了

ZnO 材料的能带结构、态密度及其光学性能, Shen 等^[18] 则计算了 Cr₂O₃ 材料结构和磁学性能. 本文采用第一性原理的方法研究 Al 掺杂 SnO₂ 材料, 对 Al 替代 Sn 原子情况下的电子结构和光学性质进行计算, 并对其性能进行分析, 得到了有意义的结果.

2. 理论模型

能带计算采用基于密度泛函理论第一性原理的线性缀加平面波(FP-LAPW)方法, 应用广义梯度近似(GGA)处理相互关联交换势, 对 SnO₂ 不同掺杂情况进行模拟计算. SnO₂ 是一种四面体金红石结构, 属 $P4_2/mnm$ 空间群, 其原胞包含两个 Sn 原子和四个 O 原子, Sn 原子占据四面体体心位置和顶点位置. 对 Al 掺杂 SnO₂ 构建 $2 \times 2 \times 2$ 超晶胞结构进行模拟计算, 取 SnO₂ 晶格常数实验值为 $a = b = 0.4737$ nm, $c = 0.3186$ nm 且 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, 如图 1 示.

其理论模型为: 将原胞分成以原子为中心的半径不相交的 muffin-tin 球形区和球间区域, 球内波函数取球对称势, 球外区域取常数势, 并且取 Sn 和 O 的球半径分别为 2.0 原子单位(a.u)和 1.8 原子单位(a.u), 芯态和价态的截断能量为 -7.0 Ry (1 Ry = 13.6 eV), 且自旋极化计算中, 自洽运算收敛标准设为 0.0001 Ry. 该 $2 \times 2 \times 2$ 超晶胞共包含 16 个

* 国家自然科学基金(批准号: 60471042)与山东省自然科学基金(批准号: ZR2010EL017)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: ss_wangpj@ujn.edu.cn

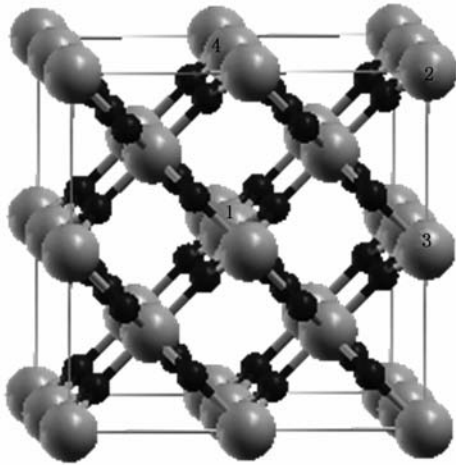


图1 $2 \times 2 \times 2$ SnO_2 超晶胞 1—4 代表 Al 替代 Sn 原子的位置, 灰色大球为 Sn 原子, 黑色小球为 O 原子

Sn 原子和 32 个 O 原子, 在自旋极化计算中考虑 Al 替代 Sn 原子的情况, 替代原子数分别为 1—4, 所对应的掺杂量各为 $x = 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$. 为了避免轨道杂化效应, 我们使掺杂的任何两个 Al 原子都不与同一 O 原子相连, 同时两个 Al 原子间成分离状态, 以减少交换关联造成的影响. 计算中考虑的价电子有: O 2s, 2p 态; Al 3s, 3p 态; Sn 5s, 5p 态.

3. 计算结果

3.1. 电子结构

3.1.1. 能带结构

在前面的工作中已经计算得到了本征 SnO_2 的

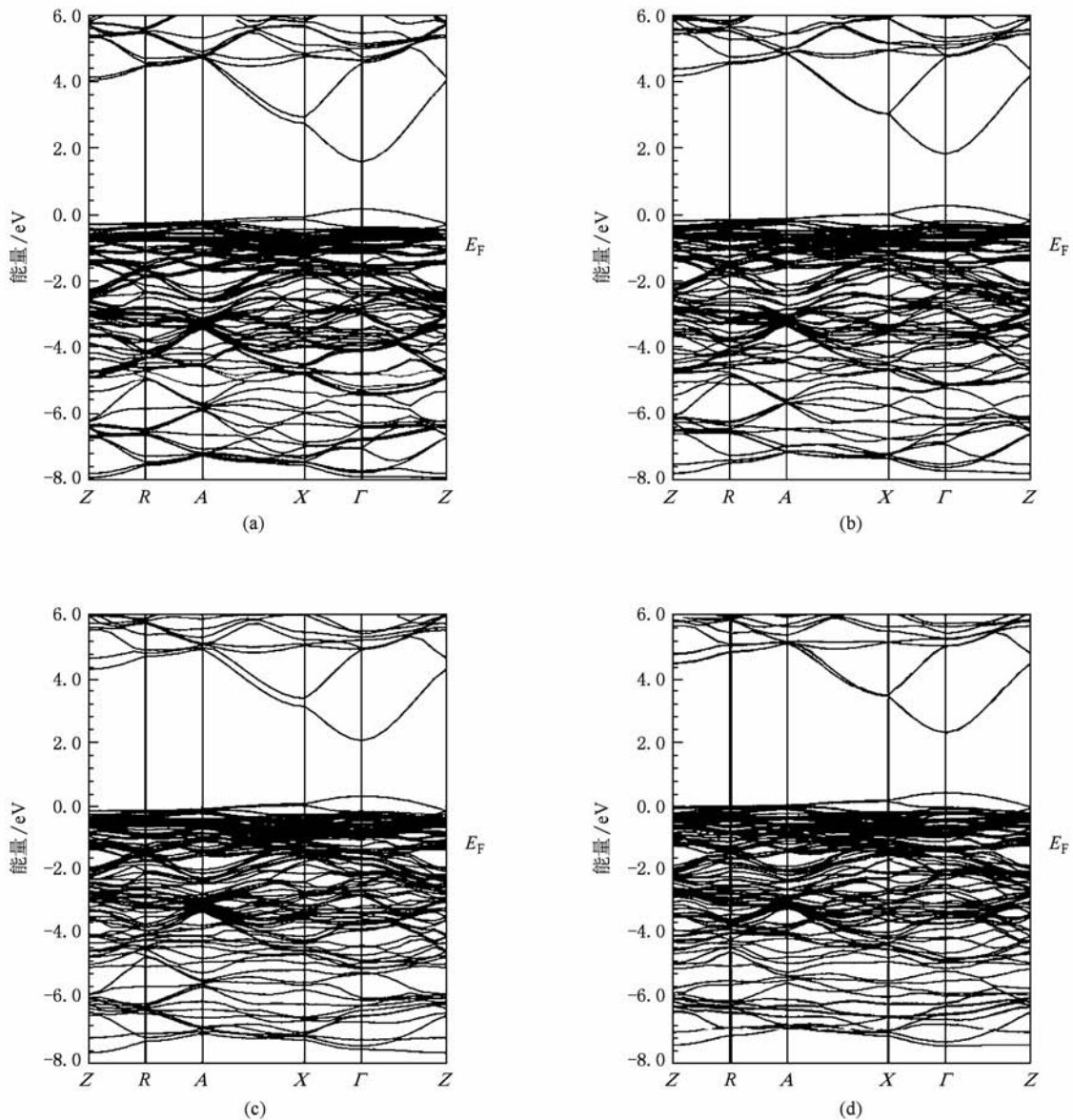


图2 $\text{Sn}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_2$ 的能带结构 (a) $x = 0.0625$, (b) $x = 0.125$, (c) $x = 0.1875$, (d) $x = 0.25$

电子结构和光学性质^[19],图2给出的是 Al 掺杂量在 $x = 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$ 时的超晶胞结构能带图, E_F 为费米能级. 四种超晶胞掺杂结构均属宽禁带直接带隙半导体, 导带底和价带顶都对称地位于 Γ 点处, 相应的禁带宽度分别为 1.69, 1.80, 1.93 和 2.1 eV, 带隙值呈逐渐增大趋势, 且都大于本征态时的禁带宽度, 说明 Al 原子的掺杂量从 1 到 4 逐渐增加的过程中, 掺杂化合物的带隙也逐渐增宽. 采用 GGA 近似使所得带隙偏低, 尝试采用交换相关能对 Sn 的分态电子进行库仑势 U 修正, 修正值 U 大小取 5.0, 修正后得到本征带隙约为 3.32 eV. Roman 等^[20]采用 LDA + U 的方式, 在改进修正参数后得到 3.4 eV 的带隙值, 与我们的修正值非常接近, 也与实验值相符合, 证明我们的计算方法正确, 具有可行性.

将 Al 掺杂各浓度下的能带结构与本征 SnO_2 的能带结构比较发现, 首先, 掺杂下的带隙值随着掺杂浓度的增大而逐渐变大, 且都大于本征值, 导带底和价带顶都向高能方向发生移动, 所有的费米能级都进入价带中; 其次, 整个能带结构上的能级数目比本征态时能级数目明显增多, 尤其是价带部分. 能级增多导致价带上能够发生能级跃迁的电子数增多, 所以材料的导电性增强.

3.1.2. 电子态密度

图3给出掺杂一个 Al 原子时的总态密度和各分态密度, 掺杂浓度为 $x = 0.0625$. 掺杂后的价带和导带上形成了杂质能级, 费米能级进入价带, 且在费米能级以上产生空穴能级, 文献[5]中也得到类似情况. 由图3可以看出 -8.0 至 -5.0 eV 的价带部分主要来自于 Sn 5s 态, 从 -5 eV 到价带顶部分则主要来自于 O 2p 态. 与不掺杂时 O 对价带顶的贡献相比, 此时 O 的作用增强, 自旋向下极化的态密度超越费米能级向高能方向移动, 且费米能级上的电子占据态来自 O 的 2p 态. 同时, 价带上形成反键态 Sn—O 键和 O—O 键, Sn 5s 态和 O 2p 态发生杂化后使能带带隙变窄, Al 的 s, p 态电子在整个价带部分的分布较弱, 并与近邻的 Sn 原子和 O 原子的部分电子态发生耦合作用. 同时, 相对于本征态, 掺杂时价带宽度发生约为 0.1 eV 的能量收缩, 与文献[12,21]在密度泛函理论下通过 GGA 或 LDA 近似获得的理论值一致, 邻近的 Sn 原子在掺杂后对价带的贡献几乎不变, 表明 Al 的引入对其影响不大. 导带仍由 Sn 5s 态占据导带底部分, Sn 5p 态则分布在

导带的较高能带部分, Al 原子与 Sn 原子中电子态的相互作用共同构成导带部分. 根据分子轨道理论, 从分态密度可以看出 Sn 和 O 之间的键合力要比 Al 和 O 之间的大, 因为前者的态密度折叠强度要比后者的强.

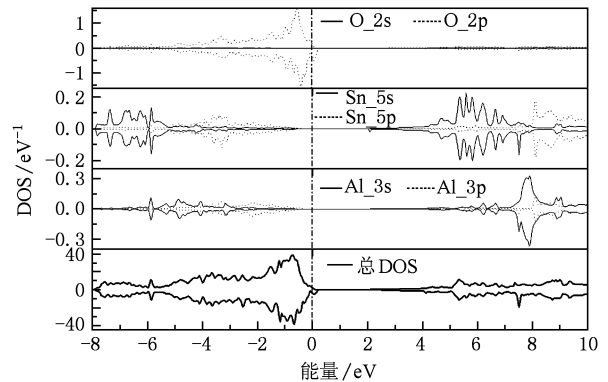


图3 Al 掺杂的总态密度和 Sn, O, Al 的各分态密度 $x = 0.0625$

由于 Sn 原子最外层有 4 个电子, Al 原子最外层只有 3 个, 当一个 Al 原子取代一个 Sn 原子进入 SnO_2 晶胞后, 在与 O 原子组成共价键时缺少一个电子, 形成空状态, 即空穴. 因此很容易从共价键中接受一个电子成为受主杂质, 把空状态转移到价键中造成材料的晶格结构发生变化, 电子之间的相互作用随之改变, 电学性质受到影响, 相应的光学性质也发生变化, 从而 SnO_2 材料掺杂与不掺杂时表现出性质不同. 为了得到 $\text{Sn}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_2$ 在不同掺杂量 x 值下的电性质, 图4给出了 Al 掺杂量自 0 到 0.25 的总态密度图.

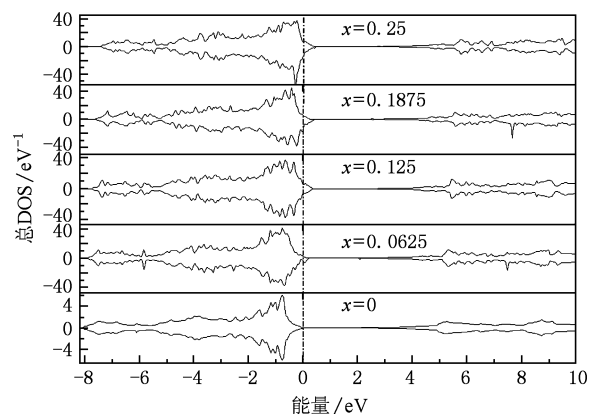


图4 $\text{Sn}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_2$ 的总态密度 $x = 0, 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$

由图4看出随掺杂量 x 增大, $\text{Sn}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_2$ 的带隙越来越宽, 表明掺入的 Al 杂质能够导致带隙增

宽. Al 掺杂量越大, Al 3s 态和邻近的 Sn 5s, O 2p 态的相互作用越强, 折叠态增多, 价带收缩增强, 同样电子局域性增强. 由于导带底主要由 Sn 的 5s 电子态构成, 当 Al 替代 Sn 时, Sn 的 5s 态对导带底的作用减弱. 上述两因素造成掺杂化合物带隙进一步变宽. 同时, 随着 Al 掺杂量的增加, 不仅是带隙逐渐变宽, 整个态密度也向高能方向发生移动, 在 Qin 等^[22]对 In:SnO₂ 的研究中, 当 In 的掺杂浓度逐渐增大时, 也发现整个体系的态密度逐渐向高能方向移动^[22]. 整体态密度向高能方向移动直接导致 Sn_{1-x}Al_xO₂ 的费米能级进入价带, 尽管导带底无明显变化, 但是价带顶的 O 2p 态作用却在逐渐增大. 正是这些原因使得电子结构发生改变, 同时成为光学性质随之变化的影响因素.

3.2. 光学性质

3.2.1. 光学介电函数

通常由光的复介电函数 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 来描述固体的宏观光学响应函数, $\epsilon_1(\omega)$ 为介电实部, $\epsilon_2(\omega)$ 为介电虚部. $\epsilon_2(\omega)$ 可以通过占据态和非占据态波函数之间的动量矩阵元求出^[23]:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2}{m^2\omega^2} \sum_{\mathbf{C}} \int_{\text{BZ}} d^3k \frac{2}{(2\pi)^3} |e \cdot \mathbf{M}_{\mathbf{C}\mathbf{V}}(\mathbf{K})|^2 \times \delta[E_{\mathbf{C}}(k) - E_{\mathbf{V}}(k) - \hbar\omega],$$

式中 m 为自由电子质量, e 为电子电量, ω 为入射光子频率, C, V 简记为导带和价带, BZ 表示第一布里渊区, \mathbf{K} 是倒格矢, $\hbar = h/2\pi$, $|e \cdot \mathbf{M}_{\mathbf{C}\mathbf{V}}(\mathbf{K})|^2$ 为动量跃迁矩阵元, $E_{\mathbf{C}}(k), E_{\mathbf{V}}(k)$ 分别为导带和价带上的本征能级, k 为波矢. $\epsilon_1(\omega)$ 可以根据 Kramer-Kronig 色散关系求出.

图 5 给出了 Sn_{1-x}Al_xO₂ 材料随掺杂量 x 变化的光学介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 谱, $x = 0, 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$. 在文献[19]对本征 SnO₂ 光学性质的计算中, 出于对密度泛函理论计算带隙偏小问题的考虑, 我们尝试用剪刀算符来进行修正, 得到了与实验值较符合的结果. 但由于 Al 掺杂 SnO₂ 有关实验光学性质方面的相关报道还较少, 所以本文计算的光学性质并未进行任何修正, 只是与本征 SnO₂ 光学性质进行比较. 不考虑接近零能量位置处的谱线变化情况, 每条虚部谱都有三个主介电峰, 分布在能量为 6.90, 9.81, 14.30 eV 附近, 但是随着掺杂量 x 值的逐渐增大, 这些谱线逐渐向高能方向移动, 发生蓝移现象, 且峰值的强度也呈逐渐减小的趋势.

光学介电函数谱主要来自于不同能级之间的

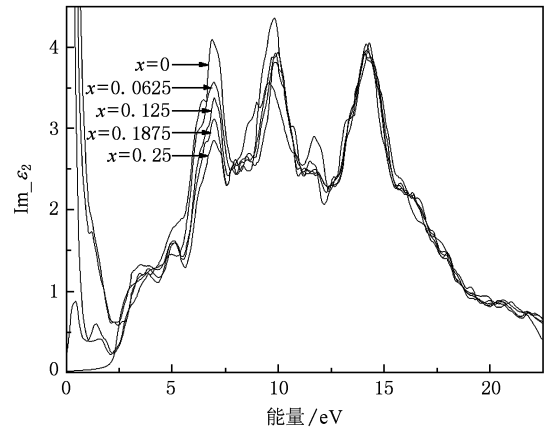


图 5 Sn_xAl_{1-x}O₂ 的介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$

跃迁, 对于本征态中的第一位置峰主要来自于价带顶的 O 2p 态到导带底的 Sn 5s 态之间的跃迁. 掺杂 Al 元素之后, 由于 Al 没有在价带顶或导带底引入杂质态, 所以第一峰的形成仍主要来源于价带顶的 O 2p 态到导带底的 Sn 5s 态的跃迁; 本征态中的第二位置峰, 主要是由 O 2p 态到 Sn 5p 态的跃迁, 第三位置峰则是由 O 2s 态电子跃迁至 Sn 5s 态能级形成, 而掺杂情况下的第二和第三位置峰, 不仅包含本征态下相应的电子跃迁, 还由于 Al 3s 和 3p 价电子的存在, 使得 Al 3s 到 Sn 5p 之间也发生电子跃迁, 促使这两个次主峰形成. 同时还发现第一位置峰随 Al 掺入量的增加, 其变化规律最为明显: 峰值强度逐渐减弱, 峰值位置逐渐右移. 这是因为: 根据第一位置峰是由位于价带顶的 O 2p 态到位于导带底的 Sn 5s 态跃迁形成的机制, 由于 Al 替代 Sn 后导带底的 Sn 5s 态减少, 导致电子可发生的此部分能级跃迁减少, 因此随着 Al 掺杂量的增加, 第二和第三位置峰的变化规律不再明显. 同时, 掺杂后的介电谱要比不掺杂时存在很多不显著的折叠态, 这是因为在晶体的能带结构中, 对同一峰值可能会由直接或间接的多能级跃迁造成. 这种在掺杂之后介电峰数量出现增加或消失, 强度变大或变小的现象, 在 Al 掺杂 ZnO 的 $\epsilon_2(\omega)$ 谱也有类似情况^[24].

3.2.2. 光学吸收谱

实质上, 吸收系数 $I(\omega)$ 及其他一些光学性质都可以由 $\epsilon_1(\omega)$ 和 $\epsilon_2(\omega)$ 给出^[25]

$$I(\omega) = \sqrt{2}\omega [\sqrt{\epsilon_1^2(\omega) - \epsilon_2^2(\omega)} - \epsilon_1(\omega)]^{\frac{1}{2}}.$$

图 6 给出了 Al 掺杂量从 0 到 0.25 变化的吸收谱线, 三个主吸收峰分别在 7.2, 10.0 和 14.6 eV 能量位置处, 对应介电虚部谱中 6.90, 9.81 和 14.30

eV 位置处的三个峰值. 当掺杂量 x 值逐渐增大, 吸收谱的峰值强度逐渐减弱, 而整个吸收谱线逐渐向高能方向发生移动, 图 6 内插图更清晰地表明了此变化. 由于半导体材料的光学吸收主要起源于激发态价带电子到导带之间的带间跃迁, 因此这些吸收谱的第一吸收峰也来自于 O 2p 态到 Sn 5s 态跃迁过程.

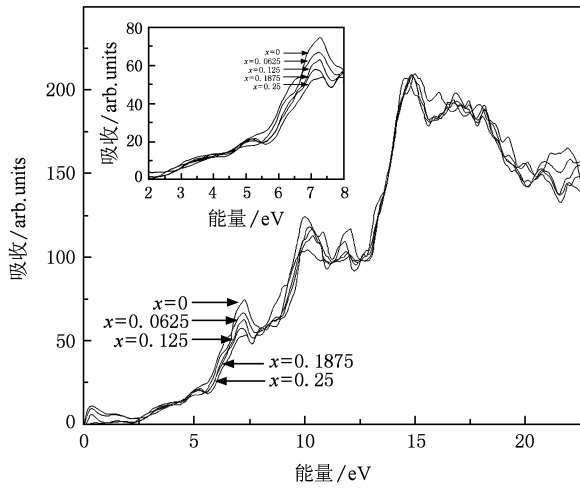


图 6 $\text{Sn}_x\text{Al}_{1-x}\text{O}_2$ 的吸收谱 内插图为局部放大

总之, 随着掺杂量 x 的增大, Al 原子的掺入造成吸收谱发生了蓝移, 表明带隙也随 x 的增大而增宽. 与此掺杂改性获得宽带隙类似的研究有 ZnO 掺杂 Al, Mg 等金属元素导致蓝移的现象^[24,26], 不仅带隙逐渐增宽, 且价带宽度出现略微收缩现象, 电子定域性增强.

3. 2. 3. 折射率和消光系数

图 7 给出了 $\text{Sn}_x\text{Al}_{1-x}\text{O}_2$ ($x = 0, 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$) 的折射率和消光系数. 图 7 (a) 表示折射率谱线, 由图可知, 接近零能量处折射率的值较大且无明显规律, 这主要与费米面和价带相交发生部分重叠有关, 与具体电子能级跃迁关系不大, 可暂不考虑. 而整个折射谱有三个主折射峰, 分别处在 7.0, 10.0 和 14.0 eV 能量附近, 与介电函数虚部谱及吸收谱中主峰位置对应. 纵观各主峰, 强度逐渐减小, 说明随着入射光子能量的增加, 折射率逐渐减小. 图 7 (b) 给出的消光系数变化谱, 该谱线与 $\epsilon_2(\omega)$ 谱的变化趋势接近, 同 $\epsilon_2(\omega)$ 谱一样可暂不考虑接近零能量位置的谱线变化, 消光系数谱的三个主峰所处位置同介电虚部谱中的一致, 所不同的是这三个峰值强度逐渐增大.

由图 7 可以看出, 当掺入的 Al 原子数从 0 到 4

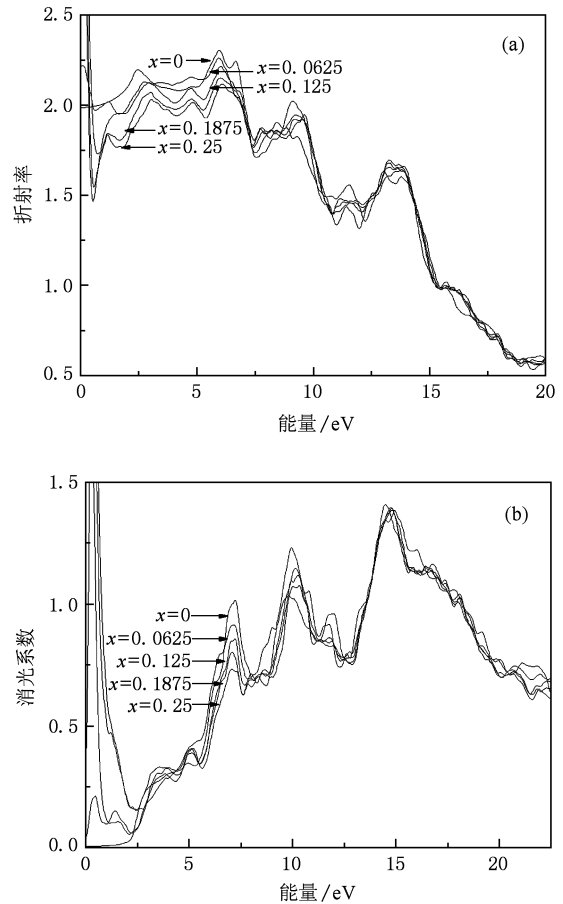


图 7 $\text{Sn}_x\text{Al}_{1-x}\text{O}_2$ 的折射率和消光系数 (a) 折射率, (b) 消光系数

逐渐增加时, 它们的谱线也逐渐向高能量方向移动, 即发生蓝移现象, 这与在电子结构中计算的带隙值逐渐增大的情况一一对应, 而且它们的跃迁机制也是一样的.

4. 结 论

采用 FP-LAPW 方法, 在 WIEN2K 程序下通过改变掺杂元素 Al 的掺杂浓度, 研究 Al 掺杂 SnO_2 晶体材料的电子结构和光学性质, 包括电子态密度、能带结构和光学介电函数虚部谱以及光学吸收谱、折射率和消光系数. 计算结果发现在 Al 掺杂浓度逐渐增大的过程中 ($x = 0, 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$), 掺杂化合物 $\text{Sn}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_2$ 的带隙逐渐变宽, 引入的 Al 杂质能级在导带部分与 Sn 5p 态电子相互作用增强, 吸收谱与介电函数虚部谱线相对应, 当掺杂量 x 增大时, 折射率和消光系数的谱线均发生蓝移.

- [1] Chopra K L, Major S, Pandya D K 1983 *Thin Solid Films* **102** 1
- [2] Dawar A L, Joshi J C 1984 *J. Mater. Sci.* **19** 1
- [3] Kaplan L, Ben Shalom A, Boxman R L, Goldsmith S, Rosenberg U, Nathan M 1994 *Thin Solid Films* **253** 1
- [4] Wang H X, Yan Y, Mohammed Y S H, Du X B, Li K, Jin H M 2009 *J. Magn. Magn. Mater.* **321** 337
- [5] Du J, Ji Z G 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2388 (in Chinese) [杜娟、季振国 2007 物理学报 **56** 2388]
- [6] Errico L A 2007 *Physica B* **389** 140
- [7] Xu J, Huang S P, Wang Z S 2009 *Solid State Commun.* **149** 527
- [8] Jin R C, Weng X J, Wang L D, Zhang W J 2008 *Journal of Functional Materials and Devices* **14** 59 (in Chinese) [金仁成、翁雪军、王立鼎、张五金 2008 功能材料与器件学报 **14** 59]
- [9] Xue Y B 2008 *Journal of Dalian Jiaotong University* **29** 96 (in Chinese) [薛严冰 2008 大连交通大学学报 **29** 96]
- [10] Calderon-Munoz W R, Sen M, Jena D 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 23703
- [11] Deng Z H, Yan J F, Zhang F C, Wang X W, Xu J P, Zhang Z Y 2007 *Acta Photonica Sin.* **36** 110 (in Chinese) [邓周虎、闫军峰、张富春、王雪文、徐建平、张志勇 2007 光子学报 **36** 110]
- [12] Xu J, Huang S P, Wang Z S, Lu D X, Yuan T S 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 7195 (in Chinese) [徐剑、黄水平、王占山、鲁大学、苑同锁 2007 物理学报 **56** 7195]
- [13] Zhang C W, Kao H, Dong J M 2009 *Phys. Lett. A* **373** 2592
- [14] Liu W, Cao L L 2001 *Sci. Chin. Ser B* **44** 63
- [15] Zuo C Y, Wen J, Bai Y L 2010 *Chin. Phys. B* **19** 047101
- [16] Zhang F Y, You J Q, Zeng Z, Zhong G H 2007 *Chin. Phys.* **16** 3815
- [17] Zhang F C, Zhang Z Y, Zhang W H, Yan J F, Yong J N 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2508
- [18] Shen J Q, Shi S Q, Ouyang C Y, Lei M S, Tang W H 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2551
- [19] Yu F, Wang P J, Zhang C W 2009 *Journal of University of Jinan (Sci. and Tech.)* **23** 414 (in Chinese) [于峰、王培吉、张昌文 2009 济南大学学报(自然科学版) **23** 414]
- [20] Roman L S, Valaski R, Canestraro C D, Magalhaes E C S, Persson C, Ahuja R, da Silva E F Jr., Pepe I, da Silva A F 2006 *Appl. Surf. Sci.* **252** 5361
- [21] Nabi Z, Kellou A, Mecabih S, Khalfi A, Benosman N 2003 *Mater. Sci. Eng. B* **98** 104
- [22] Qin G Q, Li D C, Feng Z J, Liu S M 2009 *Thin Solid Films* **517** 3345
- [23] Duan M Y, Xu M, Zhou H P, Chen Q Y, Hu Z G, Dong C J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6520 (in Chinese) [段满益、徐明、周海平、陈青云、胡志刚、董成军 2008 物理学报 **57** 6520]
- [24] Peng L P, Meng G J, Xu L 2007 *Journal of Higher Correspondence Education (Natural Sciences)* **21** 39 (in Chinese) [彭丽萍、孟桂菊、徐凌 2007 高等函授学报(自然科学版) **21** 39]
- [25] Chen D G, Cheng W D, Wu D S, Zhang H, Gong Y J, Kan Z G 2005 *Solid State Sci.* **7** 179
- [26] Zhang X D, Guo M L, Liu C L, Zhang L A, Zhang W Y, Ding Y Q, Wu Q, Feng X 2008 *Eur. Phys. J. B* **62** 417

Electronic structure and optical properties of Al-doped SnO₂ *

Yu Feng Wang Pei-Ji[†] Zhang Chang-Wen

(School of Science, University of Jinan, Jinan 250022, China)

(Received 21 April 2010; revised manuscript received 27 May 2010)

Abstract

Based on the full-potential linearized augmented plane-wave method (FP-LAPW), we investigated the electronic structures and the optical properties, including dielectric function, absorption spectra, refraction and extinction of Sn_{1-x}Al_xO₂ ($x=0, 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$) via substituting for Sn with Al in SnO₂ supercell. Calculated results show that the introduced Al could induce the band gap widening, and this can be attributed to the increased folded states, which lead to the contraction of the valence band and less Sn 5s states at the bottom of the conduction band. With the increasing of Al concentration, the band gap becomes wider, and the intensity of the first main peaks decreases. All of the optical spectra contain the imaginary part of dielectric function, the absorption spectrum, the refraction, and the extinction show blue shift corresponding to the increasing of the band gaps. Finally, it is expected that our results may inspire the future experimental research.

Keywords: band structure, density of states, optical properties, dielectric function

PACS: 31.15.A-, 71.15.Dx, 71.15.Mb

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60471042) and the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. ZR2010EL017).

[†] Corresponding author. E-mail: ss_wangpj@ujn.edu.cn