

# N 掺杂 SnO<sub>2</sub> 材料光电性质的第一性原理研究\*

于 峰 王培吉<sup>†</sup> 张昌文

(济南大学理学院, 济南 250022)

(2009 年 12 月 1 日收到; 2010 年 2 月 8 日收到修改稿)

采用全电势线性缀加平面波(full potential linearized augmented plane wave method, 简记为 FP-LAPW)方法, 基于密度泛函理论第一性原理计算分析 N 掺杂 SnO<sub>2</sub> 材料, 研究了在 N 替代 O 原子和 N 替代 Sn 原子情况下的电子态密度、电荷密度分布以及光学性质. 研究表明 N 掺杂替代 Sn 较之 N 掺杂替代 O 原子的带隙要宽, 都宽于 SnO<sub>2</sub> 的本征带隙, 且两种情况下 N 分别处于负氧化态和正氧化态, 其介电函数谱也与带隙对应发生蓝移, 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:** 电子结构, 态密度, 光学性质, 介电函数

**PACC:** 7115A, 7115H, 7115M

## 1. 引 言

金红石结构 SnO<sub>2</sub> 属宽禁带半导体材料, 空间群为  $P4_2/mnm$ , 具有很好的电学和光学性质, 是一种透明导电氧化物 (transparent conductive oxide, 简记为 TCO). 实验上它的禁带宽度是 3.6 eV, 激子束缚能达 130 meV<sup>[1,2]</sup>. SnO<sub>2</sub> 基半导体材料被认为是下一代非常具有发展潜力的一种光电材料, 对它进行掺杂后形成的新型材料电导率更高, 光学透过率更好. 目前为止, 人们对纯 SnO<sub>2</sub> 和金属离子掺杂 SnO<sub>2</sub> 化合物的研究, 已涉及部分电、磁方面的理论和实验讨论. 杜娟和季振国<sup>[3]</sup> 研究了 III 族元素掺杂对 SnO<sub>2</sub> 电子结构及电学性能的影响; Wang 等<sup>[4]</sup> 应用第一性原理分析了 Co 掺杂 SnO<sub>2</sub> 的磁机理; Leonardo<sup>[5]</sup> 利用第一性原理分析了 SnO 和 SnO<sub>2</sub> 的结构与性能; 徐剑等<sup>[6]</sup> 对 F 掺杂 SnO<sub>2</sub> 电子结构、能带结构和态密度进行了模拟计算, 分析了掺杂对晶体性质和光学吸收边的影响; Roman 等<sup>[7]</sup> 则从实验上研究了 SnO<sub>2</sub> 材料的光学性能; Shi 等<sup>[8]</sup> 研究了 SnO<sub>2</sub> 材料的电化学性能, Luo 等<sup>[9]</sup> 利用化学气相沉积法研究了 Mo 掺杂 SnO<sub>2</sub> 材料的性能. 但由于有关 N 掺杂 SnO<sub>2</sub> 材料的性质和机理尚不完全清楚, 因此从理论上进行深入研究, 对于 SnO<sub>2</sub> 材料的应用将具

有重要意义. 本文采用第一性原理的方法研究了 N 掺杂 SnO<sub>2</sub> 材料, 对 N 分别替代 O 原子和 Sn 原子情况下的电子结构和光学性质进行了计算, 对其性能进行了分析, 得到了有意义的结果.

## 2. 理论模型和计算方法

本文所有计算工作是在 WIEN2K 软件下完成的. WIEN2K 使用密度泛函理论计算固体的电子结构, 基于键结构计算最准确的方案——完全势能(线性)缀加平面波(FP-LAPW) + 局域轨道(lo)方法, 在密度泛函中采用局域(自旋)密度近似(local density approximation, 简记为 LDA)或广义梯度近似(generalized graduated approximation, 简记为 GGA)处理相互关联势. 线性缀加平面波(LAPW)是基于 muffin-tin 势建立起来的一种方法, 它将作为缀加平面波的基函数使用, 而全电势线性缀加平面波(full potential linearized augmented plane wave method, 简记为 FP-LAPW)是基于多极势的概念, 由 Winner 等对 LAPW 方法修正后建立起来的<sup>[10]</sup>.

从第一性原理出发, 采用广义梯度近似, 构建  $1 \times 2 \times 2$  的 SnO<sub>2</sub> 超晶胞结构, 共包括 8 个 Sn 原子和 16 个 O 原子, 在两种情况下引入 N 杂质: 用一个 N 原子分别替代一个 O 原子和一个 Sn 原子, 如图 1(a) 和 1(b) 所示, 两种情况下 N 的掺杂浓度分别是 6.25%

\* 国家自然科学基金(批准号: 60471042)和山东省自然科学基金(批准号: Y2005A05)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: ss\_wangpj@ujn.edu.cn

和 12.5%. 取  $\text{SnO}_2$  实验晶格常数<sup>[11-13]</sup>:  $a = b = 0.4737 \text{ nm}$ ,  $c = 0.3186 \text{ nm}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ , muffin-tin 球模型下价态和芯态的分离能是  $-7 \text{ Ry}$ , 自洽运算收敛标准取  $0.0001 \text{ Ry}$ . 计算中考虑的价电子有: O 原子  $2s, 2p$  态; N 原子  $2s, 2p$  态; Sn 原子  $5s, 5p$  态.

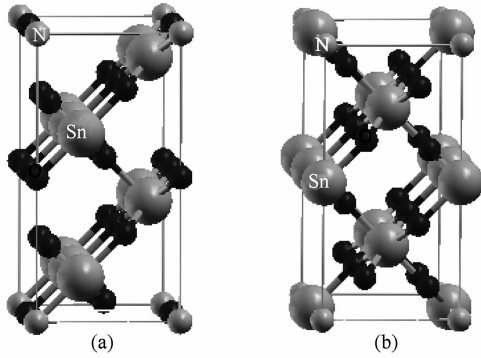


图1 晶胞结构 (a) N 原子替代 O 原子结构, (b) N 原子替代 Sn 原子结构

### 3. 计算结果与讨论

#### 3.1. 电子结构

##### 3.1.1. 态密度

N 的引入将引起  $\text{SnO}_2$  材料原晶胞电子结构的变化. 取 Fermi 能级为能量零点, 前面我们已经计算过本征  $\text{SnO}_2$  材料的电子态密度和一系列光学性质<sup>[14]</sup>, 为进一步研究两种掺杂下的电子结构、掺杂后性能的变化, 图 2 分别给出了未掺杂  $\text{SnO}_2$ , N 替代 O 掺杂和 N 替代 Sn 掺杂 3 种情况下的自旋极化电子总态密度图和分态密度. 由于  $-8 \text{ eV}$  以下能级距离 Fermi 能级较远, 与价带其他部分相互作用较弱, 且对 Fermi 能级附近电子态作用影响不大, 所以没有对此部分进行讨论.

对于本征  $\text{SnO}_2$ , 由图 2(a) 可知, 此时价带顶处自旋向上和向下的态密度都静止于 Fermi 能级处, 计算得带隙为  $1.5 \text{ eV}$ , 与文献[5] 计算的  $E_g = 1.7 \text{ eV}$  很接近, 说明我们所采用的计算方法、过程的正确性, 为下面准确进行 N 掺杂计算提供了依据. 禁带宽度小于实验值是由于引入 GGA 近似引起的, 此种情况在其他文献中同样有所报道<sup>[5,15,16]</sup>, GGA 或 LDA 近似都会使能带计算值偏低, 由于只考虑能量的相对变化, 因而对电子结构的分析不会产生影响.

N 替代 O 掺杂时, 与本征情况相比, 价带顶与导带底均发生微小移动, 带隙宽  $1.98 \text{ eV}$ , 大于不掺杂时的禁带宽度, 但仍然小于实验值. 这是因为基

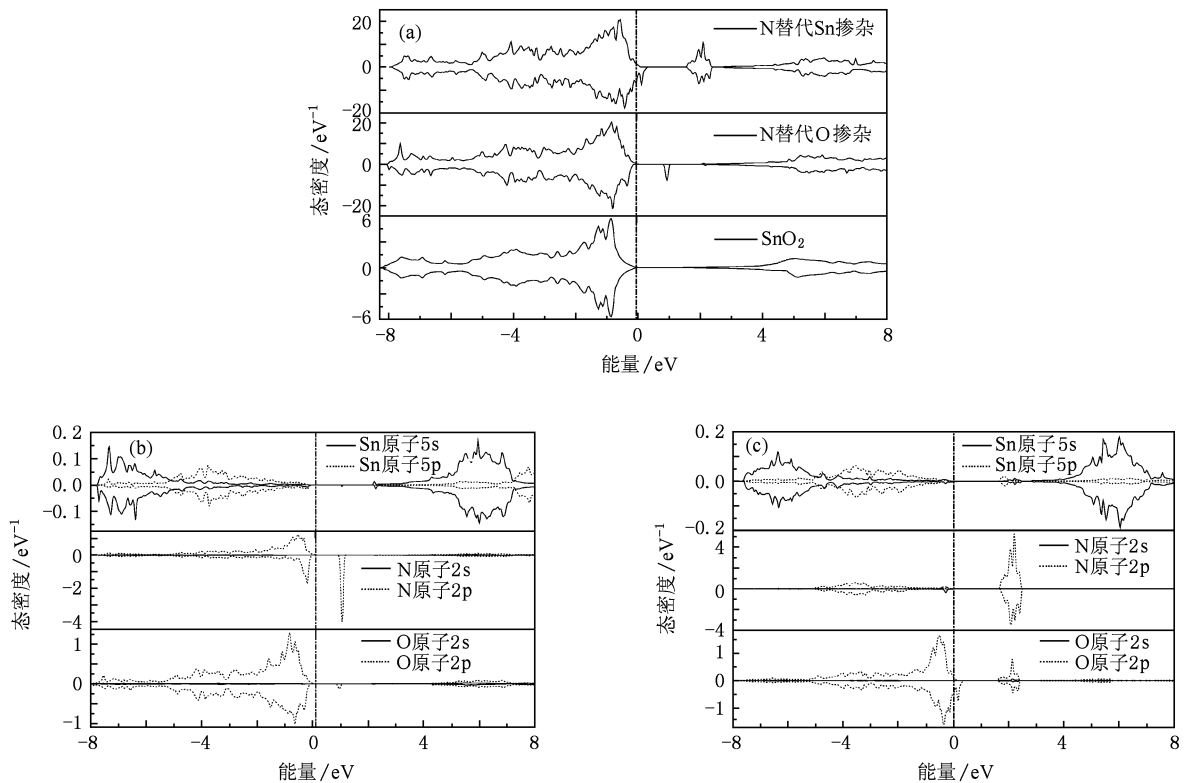


图2 态密度 (a) 3 种情况下的总态密度, (b) N 替代 O 掺杂的分态密度, (c) N 替代 Sn 掺杂的分态密度

于多粒子体系的密度泛函理论,特别是对于半导体材料,在本征和掺杂情况下的带隙计算值一般都要小于它所对应实验值的 30%—50% 左右,甚至有可能更多<sup>[17]</sup>. 此时价带部分也比不掺杂时宽 0.2 eV,价带增宽,分布的电子能级增多,价带到导带的能级跃迁概率大大增加,导电性随之增强. 由图 2(b),按照各分态密度的分布,替代 O 掺杂时的价带可以分 3 部分:价带顶到 -2 eV 范围,主要是由与 N 最近邻的 O 原子 2p 态和 N 原子 2p 态共同占据,N 和 O 的 p 轨道发生强烈的轨道耦合作用,杂化形成 Fermi 能级附近峰值;在 -2—-5.5 eV 范围部分,主要由 O 原子 2p 态和与 N 原子次近邻的 Sn 原子的 5p 态耦合形成;而 -5.5 eV 以下部分则来源于 Sn 原子 5s 态. 另外,价带顶和导带底之间不再是空带隙,在自旋向下的方向上出现了一部分局域能级,这部分能级主要来自 N 原子 2p 态电子,实验上<sup>[18]</sup>也证明了这一点:在 SnO<sub>2</sub>:N 薄膜中,N 杂质使得掺杂后 SnO<sub>2</sub> 的电子态密度在带隙内产生局域态,并形成价带和导带带尾态延伸至带隙内部. 显然,这是掺入 N 之后与本征态能级比较最明显的变化. 我们注意到 Xiao 等<sup>[19]</sup>采用第一性原理研究 N 替代 O 掺杂磁性质,得到的关于 N 掺杂后自旋极化态密度结果,与我们的计算结果基本符合. 导带则表现为 Sn 原子 5s 态占据导带底附近能级,也有少量 p 态电子存在. Sun 等也做过 N 掺杂 SnO<sub>2</sub> 的计算,得到不同的带隙值和带间跃迁导致红移的结果<sup>[20]</sup>,其 N 替代 O 和 Sn 的掺杂浓度分别为 3.125% 和

6.25%. 我们的计算带隙值小,主要原因是这里的 N 掺杂浓度是其掺杂的两倍,浓度不同,进行掺杂之后 N 与 O 的相对含量发生变化,对价带顶起主要贡献的 N 和 O 的 p 态耦合作用强度改变,价带顶的移动量随之明显改变,直接影响带隙宽度. 在 SnO<sub>2</sub> 掺杂 N 的薄膜制备和特性实验研究中,也证明了随着 N 掺杂量的增加,带隙呈减小趋势<sup>[21]</sup>.

N 替代 Sn 掺杂时,Fermi 能级进入价带,整个体系态密度向高能方向发生位移,禁带宽 2.29 eV,比 N 替代 O 掺杂下的禁带宽度还要大,且在 1.58—2.45 eV 的范围内,自旋向上和向下两个方向上都有局域态分布. 从图 2(c)可以看出,对于这部分局域态,它的形成得益于 N 原子 2p 提供多数电子,并有少量的 O 原子 2s2p 和 Sn 原子 5s5p 态,三者相互作用共同形成. 对于此时掺杂形成的能带,O 原子 2p 态形成了靠近 Fermi 能级附近价带的跃迁峰,相比较替代 O 掺杂时,N 此时几乎不参与作用. 价带其他部分与导带部分都与替代 O 时类似,所以不再赘述. 比较两种掺杂情况,由于替代 O 时的带隙要小于替代 Sn 时,因而发生跃迁时从外界获取的吸收能也较小,加之 N 与 O 的离子半径最为接近,使得 N 更容易替代 O 位,形成 N 替代 O 掺杂化合物.

### 3.1.2. 能带结构

图 3 是 N 分别掺杂替代 O 和替代 Sn 时自旋向下方向的能带结构. 取 Fermi 能级为零能量参考点,只考虑较为接近 Fermi 能级的部分价带和部分导带.

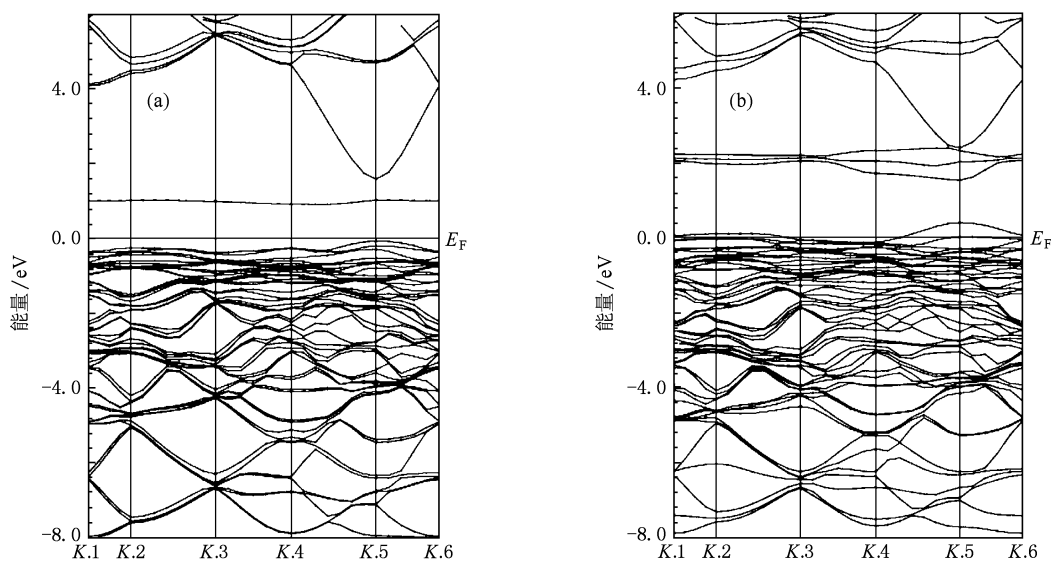


图 3 自旋向下方向的能带结构 (a) N 替代 O 掺杂,(b) N 替代 Sn 掺杂

从图 3(a)上可以看出,掺入 N 后仍属宽禁带直接带隙半导体,价带顶和导带底对称地位于  $K_5$  位置处,两者之间的最小宽度为 1.98 eV. 价带顶和导带底之间,在 1.0 eV 能量位置处出现一条由局域电子形成的细强局域带,其形成原因是部分自旋 N 原子 2p 电子态进入带隙内,占据约 0.25 eV 的宽带,同时由于 N 的影响使得在相同能量位置处也有微量 O 电子态出现,化合物此时表现半金属性质;而对于图 3(b),此时价带顶和导带底也是对称地位于  $K_5$  点,  $E_F = 2.29$  eV. 与图 3(a)中带隙内出现的局域能级相比,图 3(b) 在 2.0 eV 处出现多条能级,这是由于 N 原子 2p 能级进入带隙,轨道发生自旋劈裂形成,另外 N 的引入也使得与之最近邻的 O 和 Sn 的电子结构受到影响,在相同能量范围产生 s 电子和 p 电子, N, O, Sn 轨道能级重叠,耦合作用增强,此时掺杂化合物表现为金属特性. 同时,替代 Sn 时的价带顶处有多条来自 O 原子 2p 的电子能级越过 Fermi 能级,由于能级上空穴子间的相互排斥作用使得价带顶产生了空穴载流子.

类似有 N 掺杂  $\text{TiO}_2$  金红石晶体的研究<sup>[22]</sup>, 掺杂后带隙内在进行 N 替代非金属离子时,自旋向下方向上出现局域态,替代金属离子掺杂时,自旋向下、向上两个方向上都出现了局域电子占据态,因而形成的化合物也分别呈现出半金属性和金属性质. 结合态密度谱线比较两种掺杂, N 在替代 O 时对靠近  $E_F$  能级的价带部分提供的电子态数目要明显多于替代 Sn 中的数目; Fermi 能级都不同程度地进入价带形成简并态,但后者进入的程度要更深一些.

### 3.1.3. 电子密度

通过实空间缺陷态的自旋电子等截面密度图可以形象地描述缺陷态的局域化,如图 4 所示,各位置处元素与图 1 中对应. 缺陷态波函数的局域化形成了自旋极化缺陷态和具有高自旋能的局域自旋磁矩.

一般讲来,由于 N 原子最外层有 5 个电子,化合物成键过程中容易得到电子而显 -3 价. 由于  $\text{SnO}_2$  中 O 为 -2 价,图 4(a)中当 N 替代 O 掺杂时, N 与邻近的 Sn 原子形成配位键,引入空穴载流子,绕缺陷态形成了较大的局域磁矩,文献[19]的自旋密度分布图也证明了 N 原子是磁矩形成的主要贡献者,与 N 邻近的 O 原子也发生轻微极化. N 原子发生自旋极化,此时显示的是  $N^{-2}$ ,处于一种负氧化

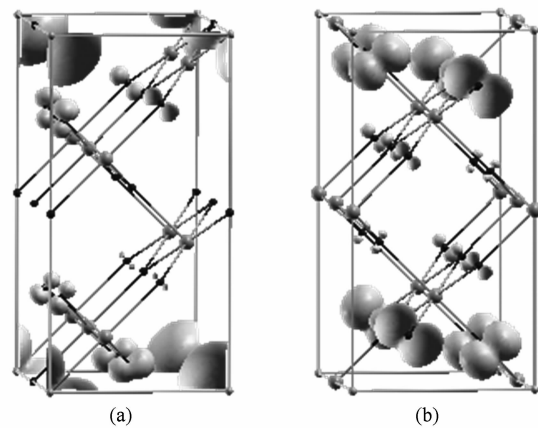


图 4 电子密度 (a) N 替代 O 掺杂, (b) N 替代 Sn 掺杂

态,且具有较高的杂质自旋极化能. 对于 N 替代 Sn 掺杂,与 N 位邻近的 O 发生自旋极化, N 原子与邻近 O 原子形成 N—O 化合键,此时 N 处于正氧化态,与文献[20]的分析结果基本一致. 我们还注意到极化磁矩大部分位于绕缺陷态周围的 O 原子上,强束缚能束缚着这些电荷以补偿空穴载流子,从而形成了相当大的局域杂质势,在 N 替代 O 掺杂模型中,绕 N 原子周围电子的局域化程度要远强于 N 替代 Sn 中的.

### 3.2. 光学性质

晶体中光子和电子的相互作用可以用基态电子态波函数的含时微扰项来描述. 光子的电场扰动引起了占据态和非占据态之间的光学跃迁,激发态产生的光谱可以被认为是价带和导带之间的联合态密度. 在线性光学响应范围内,通常由光的复介电函数  $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$  来描述固体的宏观光学响应函数,  $\varepsilon_2(\omega)$  为介电虚部,通过占据态和非占据态波函数之间的动量矩阵元求出<sup>[23]</sup>:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2}{m^2\omega^2} \sum_{\substack{C \\ V,C}} \int_{\text{BZ}} d^3k \frac{2}{(2\pi)^3} |e \cdot \mathbf{M}_{cv}(\mathbf{K})|^2 \times \delta[E_C(k) - E_V(k) - \hbar\omega].$$

式中  $m$  为自由电子质量,  $e$  为电子电量,  $\omega$  为入射光子频率, C, V 简记为导带和价带, BZ 表示第一 Brillouin 区,  $\mathbf{K}$  是倒格矢,  $\hbar = h/2\pi$ ,  $|e \cdot \mathbf{M}_{cv}(\mathbf{K})|^2$  为动量跃迁矩阵元,  $E_C(k)$ ,  $E_V(k)$  分别为导带和价带上的本征能级.  $\varepsilon_1(\omega)$  为介电实部,可以根据 Kramer-Kronig 色散关系求出. 其他光学性质,如吸收系数、反射率、折射率等也可由介电实部和虚部求出.

由于介电函数较容易与固体的微电子结构和物理微观模型相联系,因而它比宏观的一些光学常数能更好地表征材料的物理性能,下面主要来研究 3 种情况下的介电虚部谱.由于 N 掺杂 SnO<sub>2</sub> 有关光学性质的研究报道较少,所以未对本文中的光学介电函数未做任何修正,只是对 N 替代 O, N 替代 Sn 和本征状态下 SnO<sub>2</sub> 的光学性质进行比较.

图 5 给出的是 SnO<sub>2</sub> 本征态和两种掺杂体系下的介电虚部函数  $\varepsilon_2(\omega)$  谱.不考虑接近零能量位置附近的谱线情况,因为这部分与声子晶格振动有关.首先可以看到,SnO<sub>2</sub> 本征态和 N 替代 O 掺杂的  $\varepsilon_2(\omega)$  谱差异很小,两者谱线位置非常接近,且在能量为 6.90, 9.70 和 14.10 eV 位置处存在 3 个主跃迁峰.而对于替代 Sn 掺杂下,3 个跃迁峰均发生蓝移,向右移动约 0.25 eV,这与前面计算得到的带隙在 N 替代 Sn 时增幅较大的情况一致.带隙增宽,电子从价带受激跃迁到导带所需要的跃迁能增大.各跃迁峰分别来自不同价带至导带的跃迁,对于第一位置峰,替代 O 掺杂中主要是由位于价带顶的 N 原

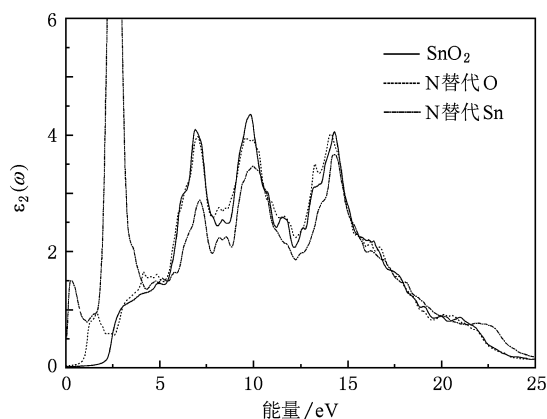


图 5 3 种情况下的介电函数虚部

子 2p 态电子跃迁到导带顶的 Sn 原子 5s 态形成的,也有一部分来源于 O 原子 2p 态到 Sn 原子 5s 态的跃迁,而替代 Sn 掺杂中的主要来自 O 原子 2p 态到 Sn 原子 5s 态的电子跃迁.对于其余两个峰值, N 替代 O 中是由 N 原子 2p 态到 Sn 原子 5p 态的跃迁和 O 原子 2p 态到 Sn 原子 5p 态的跃迁共同作用形成,而替代 Sn 中则是由不同 O 原子 2p 态上电子能级跃迁到不同 Sn 原子 5p 态形成,并有少量的 N 原子 2s 态到 Sn 原子 5p 态电子的跃迁.比较两种  $\varepsilon_2(\omega)$  谱, N 替代 Sn 的谱线较替代 O 的向高能方向发生了移动,与带隙的变化趋势一致,同时也说明了 Sn 和 N 之间的相互作用要强于 N 和 O 之间的相互作用.

#### 4. 结 论

采用 FP-LAPW 方法研究了 SnO<sub>2</sub> 晶体在 N 掺杂替代不同元素时的电子结构,分析了本征态、N 掺杂替代 O 和 N 掺杂替代 Sn 元素 3 种体系下的总态密度、电荷密度和光学介电函数虚部.从计算结果的分析来看,3 种情况的禁带宽度依次增大,且 N 替代 O 的掺杂中 N 处于正氧化态, N 替代 Sn 掺杂中 N 处于负氧化态.3 者的介电函数虚部谱总体上无较大差异,都存在有 3 个主跃迁峰,且前两种情况下的 3 个主峰值位置几乎一致,但是在 N 替代 Sn 掺杂下,各峰值均比 N 替代 O 和本征态下的发生了大约 0.25 eV 的蓝移,各跃迁峰与电子自价带到导带的跃迁吸收有关.到目前为止, N 掺杂 TiO<sub>2</sub>, ZnO 金属材料和非金属元素的研究资料有所报导<sup>[22,24-26]</sup>,但是有关 N 掺杂 SnO<sub>2</sub> 材料的研究较少,希望我们的研究结果能够为将来的理论和实验研究提供参考.

[1] Dolbec R, El Khakani M A, Serventi A M, Trudeau M, Saint-Jacques R G 2002 *Thin Solid Films* **419** 230  
 [2] Aukkaravittayapun S, Wongtida N, Kasecwatin T, Charojrochkul S, Unnanon K, Chindaudom K 2006 *Thin Solid Films* **496** 117  
 [3] 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]  
 [4] Wang H X, Yan Y, Mohammed Y Sh, Du X B, Li K, Jin H M 2009 *J. Magn. Magn. Mater.* **321** 337  
 [5] Leonardo A E 2007 *Physica B: Condens. Matter* **389** 140  
 [6] 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]  
 [7] Roman L S, Valaski R, Canestraro C D, Magalhães E C S, Persson C, Ahuja R, da Silva E F Jr, Pepe I, Ferreira da Silva A 2006 *Appl. Surf. Sci.* **252** 5361  
 [8] Shi S L, Liu Y G, Zhang J Y, Wang T H 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4564  
 [9] Luo Z H, Tang D S, Hai K, Yu F, Chen Y Q, He X W, Peng Y H, Yuan H J, Yang Y 2010 *Chin. Phys. B* **19** 026102  
 [10] Wimmer E, Krakauer H, Weinert M, Freeman A J 1980 *Phys. Rev. B* **24** 864.

- [11] Thangaraju B 2002 *Thin Solid Films* **402** 71
- [12] Hazen R M, Finger L W 1981 *J. Phys. Chem. Solid* **42** 143
- [13] Bolzan A A, Fong C, Kennedy B J, Howard C J 1997 *Acta Cryst. B* **53** 373
- [14] Yu F, Wang P J, Zhang C W 2009 *J. 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]
- [15] Nabi Z, Kellou A, Mécabih S, Khalfi A, Benosman N 2003 *Mater. Sci. Engng. B* **98** 104
- [16] Xu J, Huang S P, Wang Z S 2009 *Solid State Commun.* **149** 527
- [17] Chen K, Fan G H, Zhang Y, Ding S F 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3138 (in Chinese) [陈琨、范广涵、章勇、丁少锋 2008 物理学报 **57** 3138]
- [18] Pan S S, Ye C, Teng X M, Li L, Li G H 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 251911
- [19] Xiao W Z, Wang L L, Xu L, Wan Q, Zou B S 2009 *Solid State Commun.* **149** 1304
- [20] Sun X Q, Long R, Cheng X F, Zhao X, Dai Y, Huang B B 2008 *J. Phys. Chem. C* **112** 9861
- [21] Pan S S, Ye C, Teng X M, Fan H T, Li G H 2006 *Appl. Phys. A* **85** 21
- [22] Yang K S, Dai Y, Huang B B, Han S H 2006 *J. Phys. Chem. B* **110** 24011
- [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] Xu L, Tang C Q, Dai L, Tang D H, Ma X G 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1048 (in Chinese) [徐凌、唐超群、戴磊、唐代海、马新国 2007 物理学报 **56** 1048]
- [25] Peng L P, Xu L, Yin J W 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1585 (in Chinese) [彭丽萍、徐凌、尹建武 2007 物理学报 **56** 1585]
- [26] Duan M Y, Xu M, Zhou H P, Shen Y B, Chen Q Y, Ding Y C, Zhu W J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5359 (in Chinese) [段满益、徐明、周海平、沈益斌、陈青云、丁迎春、祝文军 2007 物理学报 **56** 5359]

## First-principles study of optical and electronic properties of N-doped SnO<sub>2</sub> \*

Yu Feng Wang Pei-Ji<sup>†</sup> Zhang Chang-Wen

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

(Received 1 December 2009; revised manuscript received 8 February 2010)

### Abstract

Using first-principles full potential linearized augmented plane wave method (FP-LAPW), we present the isosurface of spin density, total density of states and optical properties of undoped SnO<sub>2</sub>, substitutional N for O and substitutional N for Sn in SnO<sub>2</sub>. The results show that the band gap in two kinds of N-doped SnO<sub>2</sub> is wider than that of SnO<sub>2</sub> eigenstate, and the imaginary part of the dielectric function makes a blue shift corresponding to the increasing band gaps. It points out the relationship between electronic structure and optical properties in theory.

**Keywords:** electronic structure, density of states, optical properties, dielectric function

**PACC:** 7115A, 7115H, 7115M

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60471042) and the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. Y2005A05).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: ss\_wangpj@ujn.edu.cn