

第一性原理研究 Fe 掺杂 SnO_2 材料的光电性质*

逯 瑶 王培吉[†] 张昌文 冯现佯 蒋 雷 张国莲

(济南大学物理学院, 济南 250022)

(2011 年 1 月 7 日收到; 2011 年 2 月 28 日收到修改稿)

采用基于第一性原理的线性缀加平面波 (FP-LAPW) 方法, 研究 Fe 掺杂 SnO_2 材料电子结构和光学性质, 包括电子态密度、能带结构、介电函数和其他一些光学图谱. 研究表明, 掺 Fe 后材料均属于直接跃迁半导体, 且呈现半金属性; 随掺杂浓度增加, 费米能级进入价带, 带隙逐渐减小, Fe 原子之间耦合作用增强; 通过掺杂能够在一定程度上改变成键性质, 使其具有金属键性质. 光学谱线 (吸收谱、消光系数等) 与介电函数虚部谱线相对应, 均发生蓝移, 各峰值与电子跃迁吸收有关, 从理论上指出光学性质和电子结构的内在联系.

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

二氧化锡 (SnO_2) 材料是一种具有金红石结构的宽禁带 n 型半导体材料, 空间群属 $P4_2/mnm$, 常温下禁带宽度为 $E_g = 3.6 \text{ eV}$ 、激子束缚能为 130 meV ^[1], 在多个领域如气敏元件、太阳能电池、电极材料及半导体元件等方面有着广泛的应用前景^[2], 是一种重要的无机功能材料. 迄今为止, 人们对无掺杂和掺杂 SnO_2 材料已有一些理论研究, 杜娟等采用密度泛函平面波赝势方法对含 III 族杂质 SnO_2 超晶胞的电子结构进行了研究^[3]; 于峰等运用第一性原理计算了掺 Al、掺 N 下 SnO_2 的电子态密度和光学性质^[4,5]; Barbarat 等^[6]运用第一性原理研究了 SnO_2 的电学、光学等性质, 发现了化学键与光学性质的关联性; Jochan 等^[7]通过蒸气沉积技术制备了 Cu, Fe, Mn 共掺下 SnO_2 半导体透明薄膜. 一系列研究表明掺杂后的 SnO_2 具有多种特殊性能, 例如高导电性、高透光性、高红外反射率、高紫外吸收率等^[8,9], 特别是掺杂过渡金属原子如 Co, Mn, Cr, V, Ni 等^[10,11], 使 SnO_2 具有了更广泛的应用前景.

Fe 作为过渡金属元素, 目前关于其掺杂二氧化

锡材料的性质研究相对较少, 但关于三价铁掺杂锐钛矿二氧化钛的研究取得了很大进展, 获得了晶格常数、带隙等重要几何及电子结构参数, 且发现红移现象^[12,13]. Debernardi 等运用第一性原理研究了有内在缺陷的稀磁铁掺杂 ZnO 的磁性相互作用, 分析了磁性的起源^[14]. Zuo 等利用第一性原理计算了 ZnO 材料的能带结构、态密度和其光学性能^[15,16], Shi 等研究了 SnO_2 纳米结构在锂离子电池中的电化学性质^[17]. 由于 Fe 原子最外层有 2 个电子, Sn 原子最外层有 4 个电子, 当一个 Fe 原子取代一个 Sn 原子进入 SnO_2 以后, 在与 O 原子形成共价键时会因缺少电子而形成空穴, 造成掺杂和无掺杂时 SnO_2 材料表现出不同的性质. 因而, 我们运用第一性原理对不同浓度 Fe 掺杂 SnO_2 材料进行了研究, 计算了 SnO_2 材料的电子结构、能带及光学性质, 并且理论上进行了分析.

2. 理论模型

本文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^[18], 应用广义梯度近似 (GGA) 处理相互关联交换势, 通过在 Linux 系统中运行的 Wien2k 软件计算 Fe 掺杂 SnO_2 超晶胞

* 国家自然科学基金 (批准号: 61172028)、山东省自然科学基金 (批准号: ZR2010EL017) 和济南大学博士基金 (批准号: xbs1043) 资助的课题.

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

结构的电子结构、能带及光学性质.

图1为 $\text{SnO}_2 2 \times 2 \times 2$ 超晶胞结构,其中包含16个Sn原子和32个O原子,Fe替代Sn原子数分别为1—4,对应的掺杂量 $x = 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$. 为避免出现轨道杂化效应,掺杂的任何两个Fe原子都不与同一O原子相连.

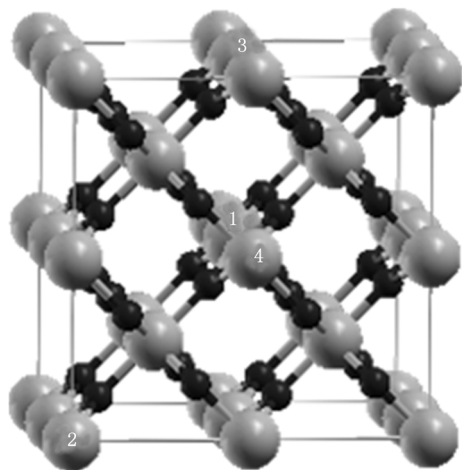


图1 $\text{SnO}_2 2 \times 2 \times 2$ 超晶胞结构 (图中灰色大球代表Sn原子, 黑色小球代表O原子, 1—4位置为Fe替代Sn原子)

由于有关Fe掺杂 SnO_2 的实验和理论相关研究报道较少,因而我们主要对本征态和不同掺杂浓度下 SnO_2 材料的性质变化进行研究,计算中取 SnO_2 材料晶格常数的实验值: $a = b = 0.4737 \text{ nm}$, $c = 0.3186 \text{ nm}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ^[19,20], Sn, O, Fe原子的muffin-tin球半径分别取2.0 a. u., 1.8 a. u., 2.0

a. u., 价态、芯态的截断能量均为 -7.0 Ry , 自洽运算的收敛标准定为 0.0001 Ry , k 点数取为50. 考虑的价电子有 Sn: $5s^2 5p^2$, O: $2s^2 2p^4$, Fe: $4s^2 3d^6$.

3. 结果与讨论

3.1. 电子结构

3.1.1. 态密度

图2为掺杂一个Fe原子时 SnO_2 电子结构的总态密度和分波态密度图,取费米能级为能量零点(图中竖直虚线位置). 从图中可以看出在 $-8.5 \sim -5.6 \text{ eV}$ 的下价带范围内,总态密度主要由O 2p和Sn 5s态提供;在 $-5.6 \sim -0.7 \text{ eV}$ 的上价带范围,又分两部分: $-5.6 \sim -3.1 \text{ eV}$ 处总态密度主要由Fe 3d, O 2p和Sn 5p贡献, Sn 5s也有少量的占据态; $-3.1 \sim -0.7 \text{ eV}$ 处的总态密度主要由O 2p, Fe 3d贡献. 这说明掺杂后Fe原子的d轨道与O原子的p轨道及Sn原子的p轨道发生了耦合作用. 由于Fe 3d电子的作用,图2(d)中的费米能级附近自旋电子出现不对称分布,只存在自旋向下的电子态,材料表现出半金属性. 在 $0.3 \sim 8.5 \text{ eV}$ 的导带区, $0.3 \sim 2.6 \text{ eV}$ 范围总态密度主要由Fe 3d提供,表明掺Fe后对费米能级附近的电子改变较大;在 $2.6 \sim 6.4 \text{ eV}$ 范围总态密度主要由O 2p, Sn 5s态贡献; $6.4 \sim 8.5 \text{ eV}$ 处的总态密度主要由Sn 5p提供,少量的由Sn 5s以及O 2p贡献.

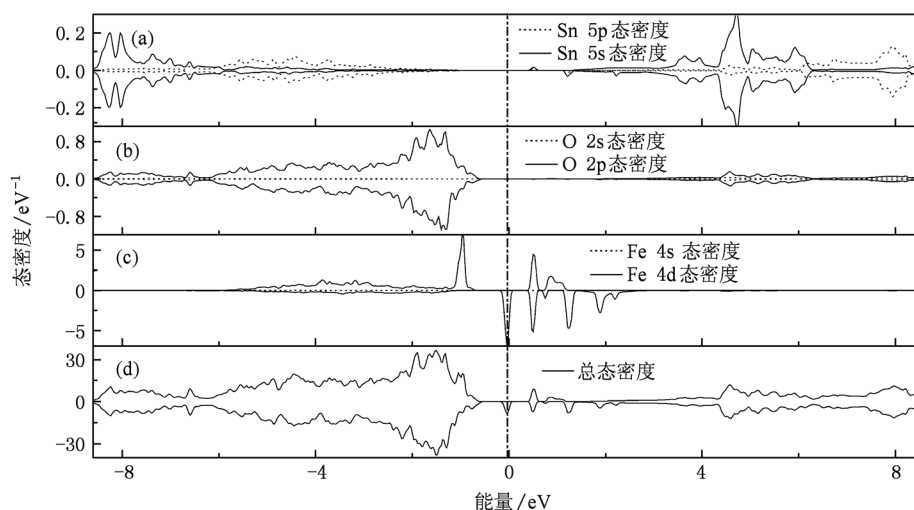


图2 掺铁 SnO_2 电子结构各态密度($x = 0.0625$) (a) Sn 5p, Sn 5s 态密度; (b) O 2p, O 2s 态密度; (c) Fe 3d, Fe 4s 态密度; (d) 总态密度

从图2可以看出,掺Fe后对总态密度费米能级处影响较大,从而影响 SnO_2 材料的光电性质,为比较不同掺杂下材料性质变化,图3给出了Fe掺杂 SnO_2 材料的总态密度.从图中可以看出,掺杂后费米能级处均出现电子的不对称分布,材料呈现半金属性,这与能带结构图中费米能级处沿布里渊区方

向展开形成的能级数增多相对应,主要是由Fe 3d态电子作用.同时,随着Fe浓度增大,整个态密度向高能方向发生移动,在文献[21]中In掺杂 SnO_2 材料也得到了相同结论,其结构直接导致费米能级逐渐进入价带,带隙减小.

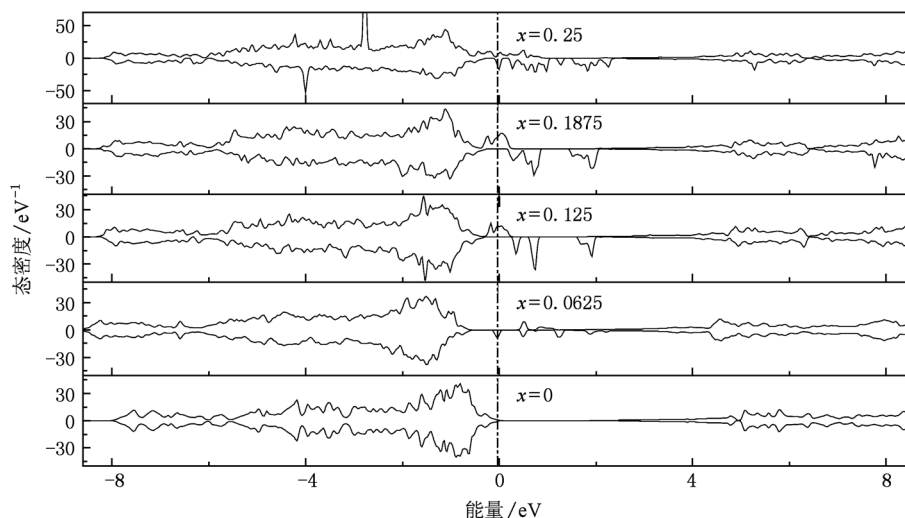


图3 不同掺杂浓度下 SnO_2 总态密度($x=0, 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$)

由图2知掺杂后Fe原子的d轨道与O原子的p轨道及Sn原子的p轨道发生了耦合作用,为了进一步研究掺杂Fe原子间的相互作用,进而计算了各掺杂浓度下Fe原子的磁矩.表1给出了各掺杂浓度下总磁矩以及杂质铁原子磁矩,理论上Fe原子替代Sn原子成键后应产生 $2.0 \mu_B$ 的磁矩,磁矩来源于Fe 3d轨道^[22],而计算中随着铁原子数的增多,其磁矩已超过 $3.0 \mu_B$,这说明多个Fe原子之间具有耦合相互作用,由于本文主要研究其光电性质,关于磁性在此不详细赘述.

表1 各掺杂浓度下Fe原子的磁矩(μ_B)
(Fe1, Fe2, Fe3, Fe4 分别对应图1中1—4原子)

掺杂浓度	总磁矩	Fe1	Fe2	Fe3	Fe4
$x=0.0625$	1.99	1.84			
$x=0.125$	8.05	3.39	3.39		
$x=0.1875$	11.65	3.39	3.13	3.41	
$x=0.25$	14.10	2.99	3.12	2.94	3.13

3.1.2. 能带结构

图4为本征态以及掺Fe后 SnO_2 能带结构图,由图可知掺杂后4种晶胞结构仍属直接带隙半导体,其带隙宽度分别为1.3, 1.5, 1.23, 1.31和0.78

eV,与图3中的态密度计算结果一致,但理论计算值都小于实验值,这主要归因于广义梯度近似(GGA)带来的影响^[23]:低估了O 2p与Sn 5s, 5p电子态之间的排斥作用,使得价带升高带隙减小^[24].取费米能级为零能量参考点,只考虑较为接近费米能级的部分价带和导带,比较掺杂前后的能带结构图,掺杂后由于Fe 3d电子的作用,能级数目比本征态时明显增多,尤其是在价带部分,这使得价带上能够发生能级跃迁的电子数增多;其次掺杂后费米能级更接近价带,并且从 $x=0.125$ 浓度开始逐渐进入价带;再者掺杂后费米能级处能带细化,电子相互作用较强.因而,掺铁后造成 SnO_2 材料的导电性增强.

图5为掺杂浓度为12.5%时两个自旋方向的能带结构图,与图3中同浓度下的总态密度相一致,两个自旋方向差异主要表现在两个方面:费米能级处,由于Fe的3d态电子的影响,自旋向上方向有电子占据而自旋向下方向不存在,材料表现出非金属性;带隙内,自旋向下方向出现更多的杂质带,从而增加了电子的跃迁概率.

为进一步说明掺杂后Fe对能带结构的影响,图6给出了价带顶(VBM)和导带底(CBM)随掺杂量

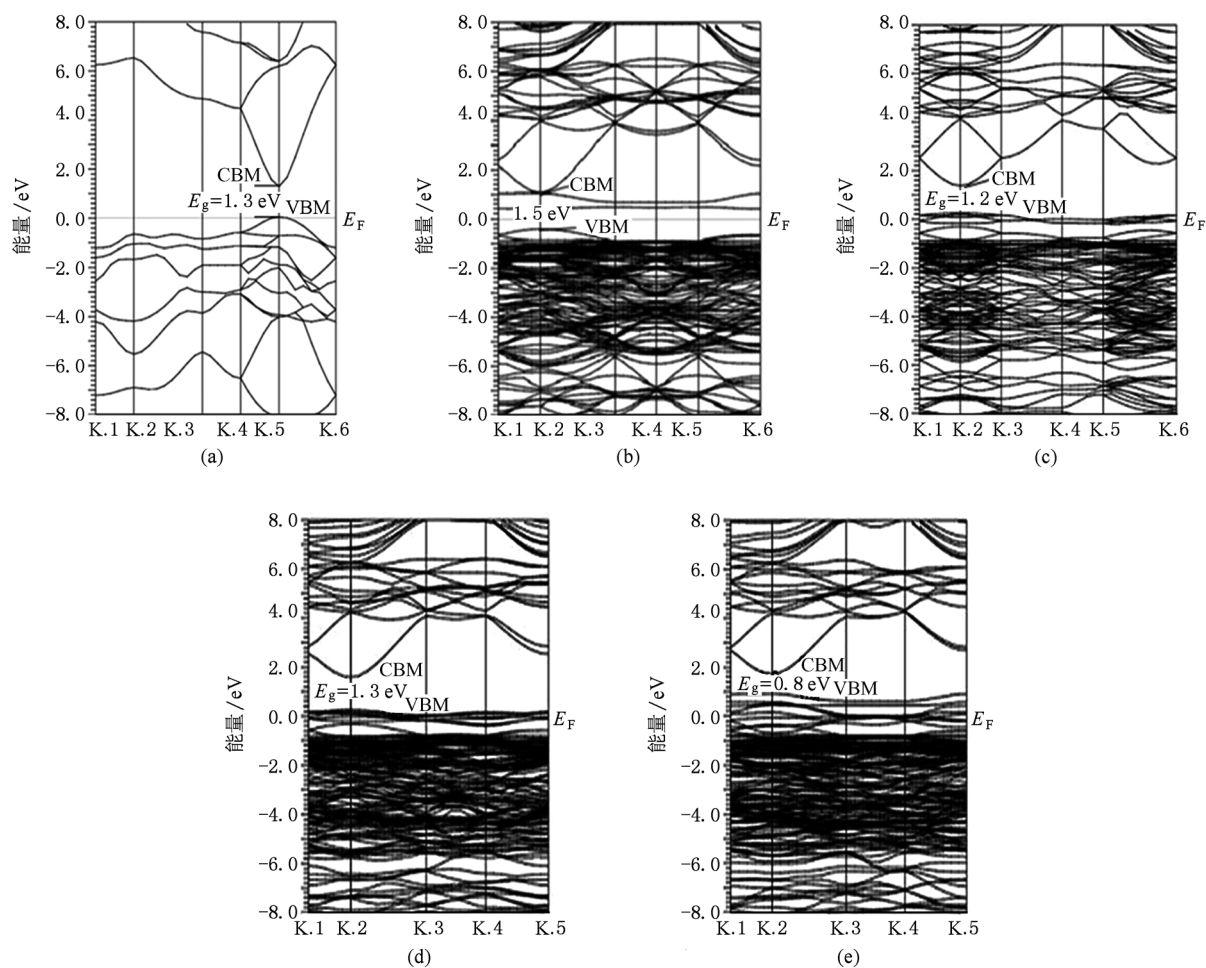


图4 不同掺杂下 SnO_2 能带结构图 (a) $x=0$; (b) $x=0.0625$; (c) $x=0.125$; (d) $x=0.1875$; (e) $x=0.25$

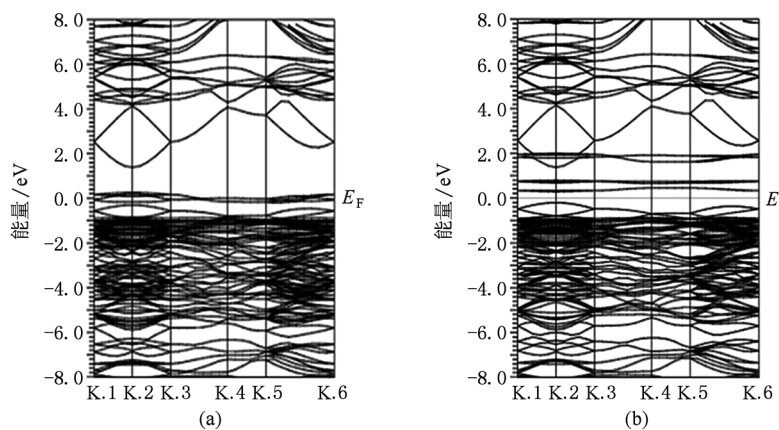


图5 $x=0.125$ 时 SnO_2 能带结构图 (a) 自旋向上; (b) 自旋向下

的变化趋势,从图中可以看出, $x=0, 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$ 时的禁带宽度分别为 1.3, 1.5, 1.23, 1.31, 0.78 eV, 总体来看随掺杂浓度增加带隙减小. 掺杂后 CBM 和 VBM 均上移, 考虑图 2 中总态密度

及分态密度图,我们认为 Fe 3d 和 O 2p 态的耦合相互作用以及 Fe 3d 态在带隙中引入的一系列杂质能级是导致 VBM 上升的主要原因. 从图 6 还可以看出, VBM 和 CBM 随着掺杂原子数 $x=1-4$ 的增加

而逐渐增大,这与 Cd 掺杂 ZnO 时的结论一致^[25],在文献[26]中对这一现象进行了理论分析,其主要原因是由于 s 电子和 p 电子的相互作用造成的.

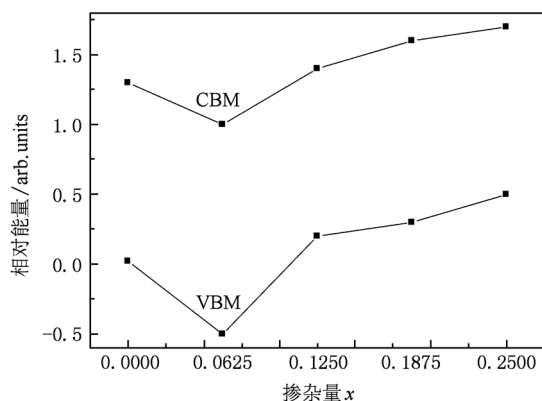


图6 不同掺杂浓度下 SnO₂ 的 CBM 和 VBM 相对位置随掺杂量的变化

3.2. 光学性质

3.2.1. 介电函数

介电函数能够反映固体的能带结构和光学图谱之间的信息,能够表征材料的物理特性,通常由复介电函数来描述固体的宏观光学响应函数. 介电函数表达式为

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega), \quad (1)$$

其中, $\varepsilon_1(\omega)$ 为函数的实部, $\varepsilon_2(\omega)$ 为函数的虚部.

介电实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 可根据 Kramer-Kronig 色散关系求出,介电虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 有如下公式^[27]:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2}{m^2\omega^2} \sum_{V,C} \int_{BZ} d^3k \frac{2}{2\pi} |e \cdot M_{CV}(K)|^2 \times \delta[E_C(k) - E_V(k) - \hbar\omega], \quad (2)$$

其中, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, m 为自由电子质量, e 为自由电子电量, ω 为入射光子频率, C 代表导带, V 代表价带, BZ 代表第一布里渊区, K 是倒格矢, $|e \cdot M_{CV}(K)|^2$ 为动量跃迁矩阵元, $E_C(k)$ 为导带上的本征能级, $E_V(k)$ 为价带上的本征能级.

图7给出了掺铁后 SnO₂ 材料的光学介电函数虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 谱,不考虑接近零能量位置附近的谱线情况,在低能量区虚部谱出现了3个主介电峰:第一位置峰范围较宽,位于 2.0—7.21 eV 范围,随掺杂浓度的增加其峰值逐渐增强,主要是由于价带顶的 O 2p 态到导带底的 Sn 5s 态之间的跃迁,第一峰附近比较杂乱,由态密度和能带结构图可知这是由于

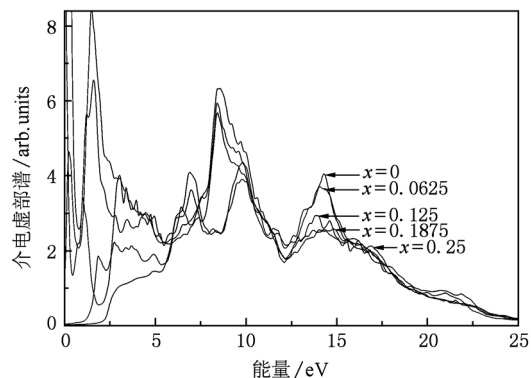


图7 不同掺杂浓度下 SnO₂ 介电函数虚部 $\varepsilon_2(\omega)$

Fe 3d 态在费米能级处有着高占据从而引入相当多的杂质能级所致;第二位置峰在约 10.05 eV 处,主要来自于 O 2p 态到 Sn 5p 态的电子跃迁;第三位置峰在 14.36 eV 附近,主要是由 O 2s 态电子跃迁至 Sn 5s 态形成,Fe 3d 到 Sn 5p 之间也发生了电子跃迁,峰值随浓度增大而逐渐减小. 我们发现浓度大于 6.25% 后谱线会形成强度很大的跃迁峰,这是由于随掺杂浓度增加,Fe 的 3d 态与 O 的 2p 态发生强烈的耦合相互作用,抵消了受主元素之间排斥势的影响,引起带隙内杂质能级的改变,降低了受主能级,提高了施主能级,从而 O 2p 态到 Fe 3d 态跃迁的电子数增多而形成强度较大的跃迁峰. 掺杂后的介电谱要比无掺杂时存在很多的折叠态,这是因为在晶体的能带结构中,对同一峰值可能会有直接或间接的多能级跃迁造成. 随着掺杂量的增加,介电峰总体上往高能方向发生蓝移,这与态密度图中带隙减小相对应.

3.2.2. 光学吸收谱

吸收系数 (absorb) 的表达式为^[18]

$$I(\omega) = \sqrt{2}\omega [\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) - \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega)]^{\frac{1}{2}}. \quad (3)$$

它的一些性质都可以由介电函数实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 和虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 给出.

图8为不同掺杂下 SnO₂ 材料的吸收谱线,3个主吸收峰分别在 7.21, 10.29 和 14.68 eV 能量位置处,与介电虚部谱中的3个主峰相对应. 可以看到随着掺杂浓度的增加,光学吸收边减小,曲线向高能级方向发生蓝移,这与介电函数虚部以及态密度的移动方向一致. 由于半导体材料的光学吸收主要来自于激发态价带电子到导带之间的带间跃迁,因而吸收谱的第一吸收峰也主要来自于 O 2p 到 Sn 5s

态的跃迁.

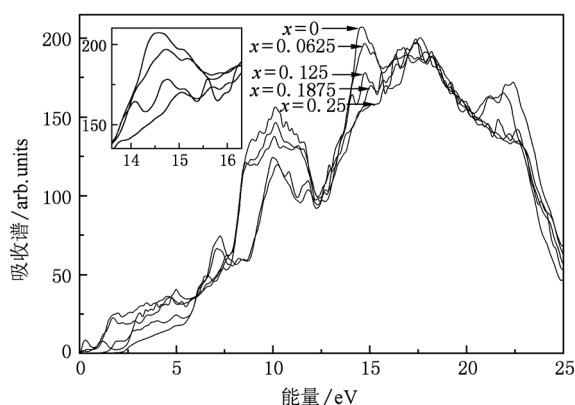


图8 不同掺杂浓度下 SnO_2 的吸收谱

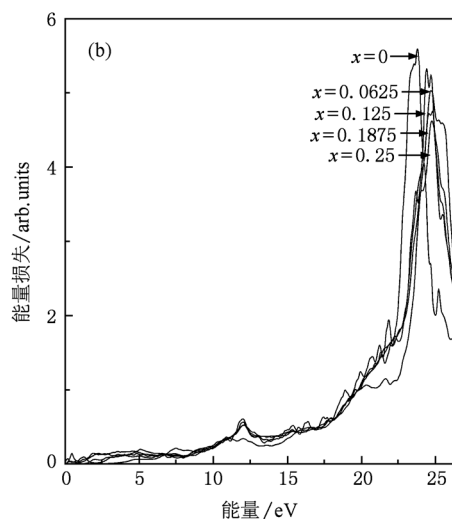
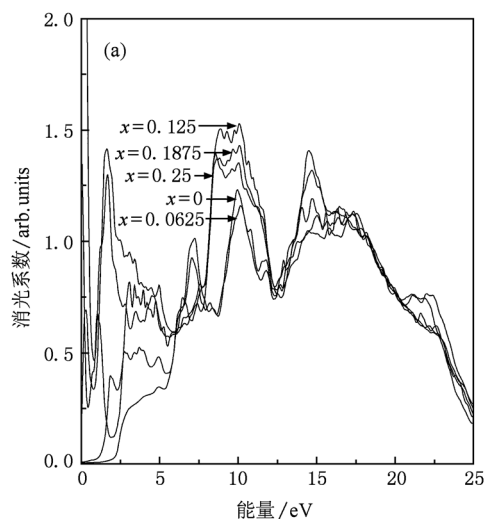


图9 不同掺杂浓度下 SnO_2 的消光系数和能量损失函数 (a) 消光系数; (b) 能量损失函数

3.3. 电荷密度

图10为非掺杂和掺杂下超晶胞电荷密度图,比较非掺杂和掺杂情况,发现原子间成键性质差异很大,原子间相互作用存在不同,体系中电荷重新分配.对于非掺杂 SnO_2 , Sn和O原子之间形成包含离子键成分的共价键;而对于掺杂体系,如图10所示,电子共有化程度提高,金属性增强,Fe原子与其临近原子形成强电荷密度重叠区,且随着Fe原子数增多,这种强电荷重叠更强,电子云向Fe原子方向偏聚,键合能力增强.

4. 结 论

采用FP-LAPW方法,在Wien2k软件下通过改

3.2.3. 消光系数和能量损失函数

图9(a)为消光系数的变化谱,该谱线与介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 谱的变化趋势相接近,消光系数谱的3个主峰所处位置同介电虚部谱中的一致,分别位于7.12, 10.28以及14.29 eV能量位置处,在低能级区出现了一系列杂乱的峰,我们认为这是由掺Fe后在费米能级处形成一系列电子占据态所致.

图9(b)为能量损失谱,能量的损失随光子能量的增大而增大,在0—22.0 eV范围内的能量损失上升得比较缓慢,最大能量损失峰在约为24.72 eV的能量位置处,并且随掺杂浓度增加峰值降低.各能量损失峰值与带间跃迁相对应,并且可以看到,随着掺杂浓度的增大,曲线发生蓝移.

变掺杂元素Fe的浓度 ($x = 0, 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$),研究Fe掺杂 SnO_2 半导体材料的电子结构和光学性质,包括电子态密度、能带结构、电荷密度以及光学介电函数虚部谱、吸收谱、消光系数和能量损失函数,研究发现:

1. 与本征态相比,掺杂后材料呈现半金属性,Fe 3d态电子的引入使得费米能级处杂质能级增多.随掺杂浓度增大,费米能级逐渐进入价带,带隙减小,电子更容易从价带跃迁至导带,导电性增强.
2. 掺杂后均属于直接跃迁半导体,能级数目比本征态时明显增多,尤其是在价带部分,这使得价带上能够发生能级跃迁的电子数增多.费米能级处能带细化,电子相互作用较强,起作用的主要是Fe 3d电子.材料表现出磁性,磁距来源于Fe 3d轨道,多个Fe原子之间存在耦合相互作用.

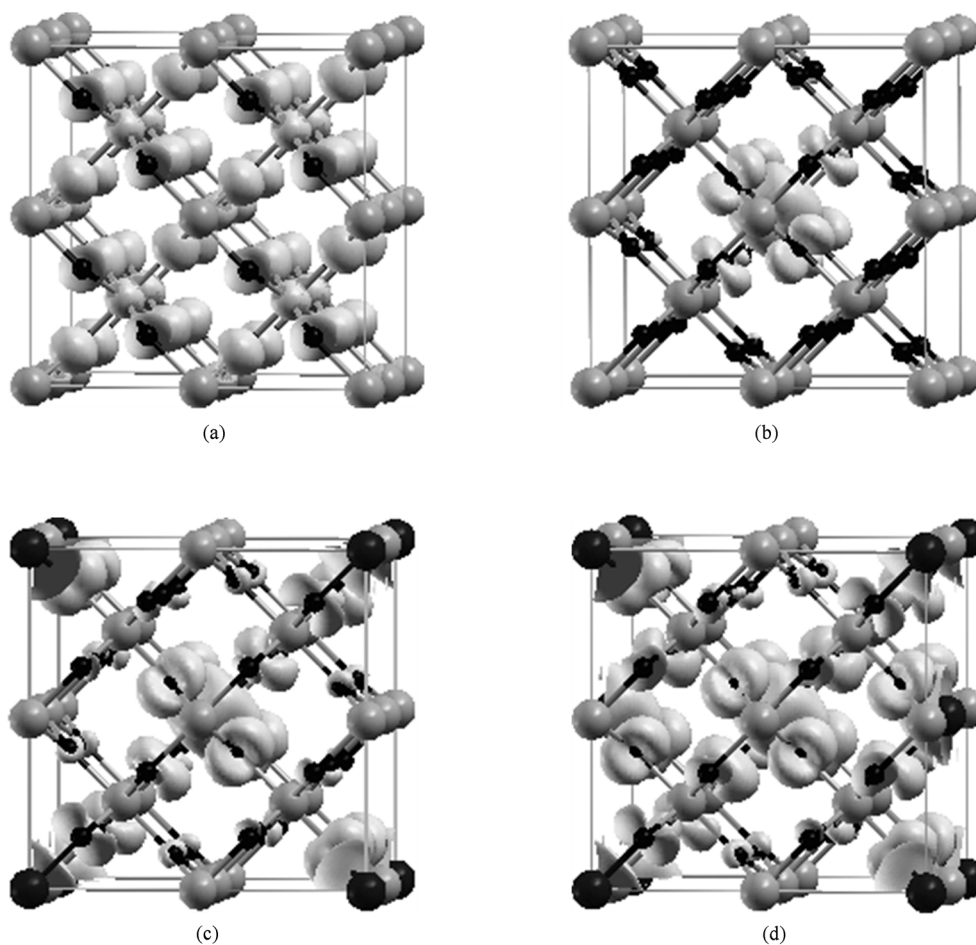


图 10 不同掺杂浓度下电荷密度图 (a) $x=0$; (b) $x=0.0625$; (c) $x=0.125$; (d) $x=0.1875$ (图中灰色大球代表 Sn 原子, 黑色小球代表 O 原子, 黑色大球代表 Fe 原子)

3. 吸收谱等其他光学谱与介电函数虚部相对应, 主峰与电子跃迁吸收有关, 当掺杂量 x 增大时, 光学吸收边减小, 各峰值均发生蓝移, 从理论上指出光学性质和电子结构的内在联系。

4. 纯 SnO_2 原子间通过包含离子键的共价键相互作用, 通过 Fe 掺杂能够在一定程度上改变其成键特性, 电荷重叠增强、系统电子共有化程度提高, 使其具有金属键性质, 从而提高二氧化锡导电性。

- [1] Wang P W, Shan X D, Zhang X Z, Yu D P 2008 *Chin. Electr. Microsc. Soc.* **27** 261 (in Chinese) [王朋伟、单旭东、章新政、余大鹏 2008 电子显微学报 **27** 261]
- [2] Zhang Z G 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5823 (in Chinese) [张志国 2008 物理学报 **57** 5823]
- [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] Yu F, Wang P J, Zhang C W 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 023101 [于峰、王培吉、张昌文 2010 物理学报 **60** 023101]
- [5] Yu F, Wang P J, Zhang C W 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7285 [于峰、王培吉、张昌文 2010 物理学报 **59** 7285]
- [6] Barbarat Ph, Matar S F, Blevinnec G L 1997 *Mater. Chem.* **7** 2547
- [7] Jochan J, Varghese M, Abraham K E 2007 *Chin. J. Phy.* **45** 84
- [8] Shanthi E, Banerjee A, Dutta V, Chopra K L 1982 *J. Appl. Phys.* **53** 1615
- [9] Kaplan L, Ben Shalom A, Boxman R L, Goldsmith S, Rosenberg U, Nathan M 1994 *Thin Solid Films* **253** 1
- [10] Zhang Y 2005 *MS Thesis* (Wuhan: Huazhong University of Science and Technology) (in Chinese) [张勇 2005 硕士学位论文 (武汉: 华中科技大学)]
- [11] Wimmer E, Krakauer H, Weinert M, Freeman A J 1980 *Phys. Rev. B* **24** 864
- [12] Chen S H, Fu C, Fu Y W 2006 *Comp. and Appl. Chem.* **23** 983

- (in Chinese)[陈书鸿、付川、傅杨武 2006 计算机与应用化学 **23** 983]
- [13] Zhang Y, Tang C Q, Dai J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 323 (in Chinese)[张勇、唐超群、戴君 2005 物理学报 **54** 323]
- [14] Debernardi A, Fanciulli M 2007 *Physica B* **401** 451
- [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] Shi S L, Liu Y G, Zhang J Y, Wang T H 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4564
- [18] Yu F, Wang P J, Zhang C W 2009 *J. Jinan University (Sci. and Tech.)* **23** 414 (in Chinese)[于峰、王培吉、张昌文 2009 济南大学学报 **23** 414]
- [19] Hazen R M, Finger L W 1981 *J. Phys. Chem. Solid* **42** 143
- [20] Bolzan A A, Fong C, Kennedy B J, Howard C J 1997 *Acta Cryst B* **53** 373
- [21] Qin G Q, Li D C, Feng Z J, Liu S M 2009 *Thin Solid Films* **517** 3345
- [22] Yu L, Zheng G, He K H, Zeng Z L, Chen Q L, Wang Q B 2010 *Acta Phys. Chim. Sin.* **26** 763 (in Chinese)[喻力、郑广、何开华、曾中良、陈琦丽、王清波 2010 物理化学学报 **26** 763]
- [23] Li W, Zhang Y F, Li Y, Chen Y, Li J J 2006 *Acta Phys. Chim. Sin.* **22** 76 (in Chinese)[林伟、章永凡、李奕、陈勇、李俊钱 2006 物理化学学报 **22** 76]
- [24] Du Y P, Chen J C, Feng J 2009 *Acta Phys. Chim. Sin.* **25** 278 (in Chinese)[杜晔平、陈敬超、冯晶 2009 物理化学学报 **25** 278]
- [25] Tang X, Lv H F, Ma C Y, Zhao J H, Zhang Q Y 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1067 (in Chinese)[唐鑫、吕海峰、马春雨、赵纪军、张庆瑜 2008 物理学报 **57** 1067]
- [26] Wei S H, Zunger A 1988 *Phys. Rev. B* **37** 8958
- [27] 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]

First-principles calculation on electronic structure and optical properties of iron-doped SnO_2 *

Lu Yao Wang Pei-Ji[†] Zhang Chang-Wen Feng Xian-Yang Jiang Lei Zhang Guo-Lian

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

(Received 7 January 2011; revised manuscript received 28 February 2011)

Abstract

By the full-potential linearized augmented plane wave method (FP-LAPW), we investigate the electronic structures and optical properties of Fe-doped SnO_2 system, including the density of states (DOS), band structure, dielectric function and other optical spectra. The calculation indicates that the Fe doped materials are all direct transition semiconductors with half-metallic property. With the increase of Fe-doping concentration, the Fermi level goes into valence band gradually, and the band gap reduces with the coupling of Fe atoms increasing. Moreover, impurity can change the property of the bond formation to some extent, and make it have metallic bond characteristic. Furthermore, we find that the optical spectrum (such as absorption spectrum), extinction coefficient, etc are blue shifted, corresponding to the imaginary part of dielectric function. The peaks are related to the transition of electrons, which indicates internal relationship between the electronic structures and optical properties theoretically.

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. 61172028), the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. ZR2010EL017) and the Doctor Foundation of University of Jinan, China (Grant No. xbs1043).

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