

SnO₂/SnSe₂ 异质结构物理性能的第一性原理研究

周慧楠¹, 王智浩¹, 刘起英², 史国华², 郁建元³, 赵洪力¹

(1. 亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室, 燕山大学材料科学与工程学院, 河北 秦皇岛 066004;

2. 威海中玻新材料技术研发有限公司, 山东 威海 264200; 3. 唐山学院, 河北 唐山 063000)

摘 要: 构建宽窄带隙同型异质结构的双层薄膜是提高透明导电薄膜光电性能的新思路。采用基于密度泛函的第一性原理, 对本征和掺杂 SnO₂/SnSe₂ 的电子结构、光学性质、载流子迁移率、电荷分布、能带排列进行计算。结果表明: 本征和掺杂 SnO₂/SnSe₂ 电子结构内部存在的电势差会使体系内部的电子向着界面处或 SnSe₂ 处转移, 处于界面处的电子会在界面间隙内形成二维电子气并在界面处高速移动, 从而提高了载流子的迁移率, 而处于 SnSe₂ 处的电子由于没有杂质离子散射的影响迁移率也相应提高, 4 种不同掺杂类型异质结构的载流子迁移率分别为 772.82、5 286.04、2 656.90 m²/(S·V) 和 17 724.60 m²/(S·V), 光学透过率在 80% 以上。

关键词: 透明导电薄膜; 异质结构; 第一性原理; 载流子迁移率

中图分类号: O77 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2023)10-2626-08

网络出版时间: 2023-07-27



First-Principles Studies on Optical and Electrical Properties of Intrinsic and Doped SnO₂/SnSe₂ Heterostructures

ZHOU Huinan¹, WANG Zhihao¹, LIU Qiyang², SHI Guohua², YU Jianyuan³, ZHAO Hongli¹

(1. State Key Laboratory of Metastable Materials Preparation Technology and Science, College of Materials Science and Engineering, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, Hebei, China; 2. Weihai Materials Technology R&D Co.Ltd., Weihai 264200, Shandong, China; 3. Tangshan University, Tangshan 063000, Hebei, China)

Abstract: It is important to improve its electrical and optical performances of transparent conductive thin films via constructing a double-layer homogeneous heterostructure with a wide and narrow band gap. The electronic structure, optical properties, carrier mobility, charge distribution, and energy band alignment of intrinsic and doped SnO₂/SnSe₂ were calculated using the first-principles based on density functionalities. The results show that a potential difference existing in the intrinsic and doped SnO₂/SnSe₂ electronic structures causes the electrons in the system to transfer to the interface or SnSe₂, and the electrons at the interface form a two-dimensional electron gas (2-DEG) in the interface gap and move at a high speed at the interface, thereby increasing the mobility of carriers, while the electrons at SnSe₂ have a corresponding increase in mobility due to the absence of impurity ion scattering. The mobilities are 772.82, 5 286.04, 2 656.90 m²/(S·V) and 17 724.60 m²/(S·V), respectively, and the optical transmittance is >80%.

Keywords: transparent conductive oxide thin films; heterostructures; first principles; carrier mobility

上世纪 80 年代至今, 透明导电薄膜在学术和实际应用中皆取得了十足的进步。由于透明导电薄膜的导电性能好、在可见光范围内的透过率高以及在

红外光范围内的反射率高等优点引起了广大学者的关注, 使得薄膜材料成为了当今材料科学中最引人注目的研究领域之一。自透明导电薄膜发现至今的

收稿日期: 2023-02-13。 修订日期: 2023-03-31。

基金项目: 国家自然科学基金(52172105); 泰山产业领军人才工程。

第一作者: 周慧楠(1996—), 男, 硕士研究生。

通信作者: 赵洪力(1960—), 男, 博士, 教授。

Received date: 2023-02-13. Revised date: 2023-03-31.

First author: ZHOU Huinan (1996—), male, Master candidate.

E-mail: zhongguozhouhuinan@163.com

Correspondent author: ZHAO Hongli (1960—), male, Ph.D., Professor.

E-mail: zhaohongli@ysu.edu.cn

1 个多世纪以来,透明导电薄膜的种类日益繁多,主要包括金属膜系、氧化物膜系、非氧化物化合物膜系和多层膜系等,在琳琅满目透明导电薄膜中,研究最多并且在实际生活中应用最广的就是透明导电氧化物薄膜(TCO)。透明导电氧化物薄膜分为 ITO($\text{Sn}:\text{InO}_3$)、AZO($\text{Al}:\text{ZnO}$)、FTO($\text{F}:\text{SnO}_2$)等不同的种类,其中,二氧化锡(SnO_2)基透明导电氧化物薄膜由于其电阻率低、导电性能好、在可见光范围内透过率高且在红外光区的反射率高等优点,在低辐射玻璃、平面显示器、太阳能电池和气敏传感器等诸多领域有着广泛的应用,近年来倍受学者们的关注^[1]。

为了改善 SnO_2 的光学及电学性能,通常使用掺杂的方法是对 SnO_2 进行掺杂处理。目前实验中普遍用到的掺杂元素有 F、Sb、Nb、W 等^[2-8]。经研究发现,当掺杂元素比例在一定范围内时,确实能通过提高体系内部载流子浓度的方式增加材料的导电性,但是当超出一定范围时,掺杂元素会在 SnO_2 晶格内部以间隙掺杂的形式存在而形成自补偿效应^[9],同时还会由于体系内杂质离子增多而造成杂质离子散射,降低体系的载流子迁移率。

为了进一步提高 SnO_2 基透明导电氧化物薄膜的性能,有学者对其进行了多元掺杂,如 Nb/F、Mo/F、W/F、Ta/F^[10-14]等,其中 Nb/F 共掺杂 SnO_2 (NFTO)的性能表现最为优异^[10]。但是无论是单元素掺杂还是多元素掺杂,最终都会面临上述问题。为了进一步提高 SnO_2 基透明导电氧化物薄膜的导电性,Pineiz 等^[15]在 $\text{SnO}_2:\text{Eu}$ 的薄膜上沉积了 1 层 GaAs 薄膜,构建了双层薄膜 $\text{SnO}_2:\text{Eu}/\text{GaAs}$ 调制掺杂异质结构,其中 SnO_2 的带隙为 3.6 eV,而 GaAs 为 1.42 eV。结果表明,其电导率分别是 $\text{SnO}_2:\text{Eu}$ 膜的 100 倍、GaAs 的 2 倍,据分析是在界面形成了二维电子气(2-DEG)通道,使电子具有更好的流动性。

虽然 GaAs 是一种能够与宽带隙的 SnO_2 构成突变异质结的窄带隙半导体,但 As 有剧毒,对环境和人体有害,而 SnSe_2 是窄带隙(1~2 eV)的 n 型半导体,具有和宽带隙 SnO_2 构造异质结的条件,它是二维层状结构,原子层之间靠弱的 van der Waals 力结合,这种二维层状材料具有类石墨烯的性质,可以沿着垂直平面方向制备成各种异质结构而无晶格失配^[16-19];此外,它储量丰富、环境友好且化学性质稳定,能够在 600 °C 退火条件下保证性能稳定。有研究表明^[20],采用喷雾热解法在 350 °C

条件下,制备的 SnSe_2 薄膜的载流子迁移率高达 $98.8 \text{ cm}^2/(\text{S}\cdot\text{V})$ 。

本研究构建了不同掺杂的 SnO_2 基透明导电薄膜:本征 SnO_2 (TO)、氟掺杂的 SnO_2 (FTO)、铌掺杂的 SnO_2 (NTO)、氟铌共掺的 SnO_2 (NFTO)分别与 SnSe_2 构建异质结,并对其进行第一性原理计算。

1 理论计算

本研究所有性质的计算均采用 VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)程序包计算而来。

以 SnO_2 为基础,对体系整体截断能进行计算,其结果如图 1 所示。由图 1 可见,当截断能大于 400 eV 时,体系的能量变化小于千分之一,可以认为体系能量开始收敛,故将体系的平面波截断能设置为默认截断能的 1.2~1.5 倍即 500 eV 时,可满足计算需要。

在进行计算时还应当适当降低所需 k 密度(k 点就是 1 个晶格中运动的电子系统的量子数是具体计算中的抽样点),其中权重不为零的 k 点 1 个,权重为 0 的 k 点 20 个。

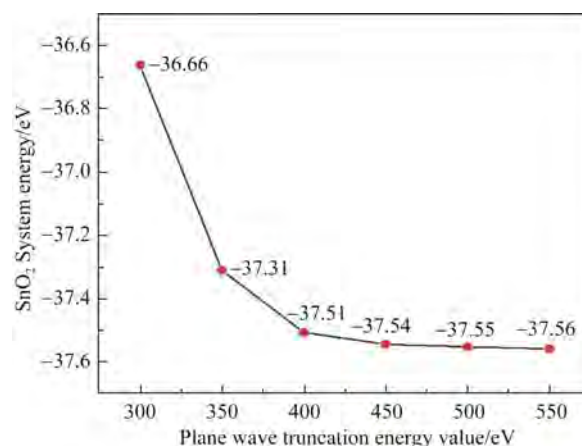


图 1 平面波截断能和 SnO_2 单胞能量的关系
Fig. 1 Relationship between plane wave truncation energy value and SnO_2 system energy

本研究所有计算的赝势类型都是基于 PBEsol 赝势的,且以 SnO_2 为例对它的晶体结构进行了结构优化,以此来确定赝势类型的选取是否正确。优化之后的晶格常数分别为 $a=4.837 \text{ \AA}$, $c=3.238 \text{ \AA}$ 。结构优化前后的晶格常数的对比如表 1 所示,优化前后晶格常数的误差小于 5%且与实验值十分接近,所以可以选择 PBEsol 赝势来进行结构参数优化的计算任务。

对比 PBE 和 HSE06 方法计算出来的带隙值分别为 1.629 eV 和 3.285 eV,相比之下 HSE06 方法计

算得到的带隙值与实验值更为吻合，因此采用 HSE06 杂化泛函方法来计算其性能。

表 1 结构优化前后晶格参数对比

Table 1 Comparison of lattice parameters before and after structural optimization

Lattice parameters	Before optimization/Å	After optimization/Å	Deviation/%
<i>a</i>	4.728	4.837	2.09
<i>b</i>	3.187	3.238	1.60

为了在减轻计算量的同时保证模型计算结果的准确性，最终将 SnO_2 择优取向度最好的(200)的表面结构设置为 5 层，为了避免优化时表面结构在 *z* 方向上的相互影响，需要合理设置真空层的厚度，经查阅 vasp 计算手册可知，真空层的厚度一般不小于 15 Å，小于 15 Å 会影响计算的准确性，大于 15 Å 虽然会确保准确性但会增加计算时间，所以为了保证减少计算时间的同时提高计算精度，将真空层的厚度设置为 20 Å，此时表面结构的表面能为 3.301 eV。将 SnO_2 设置为 $3 \times 3 \times 2$ 的超胞结构所切取的 5 层表面结构在与 SnSe_2 构成异质结构时晶格失配小于 5%，如表 2 所示，满足计算准确性要求。

表 2 异质结构的构建前后晶格参数 *a* 对比

Table 2 Comparison of lattice parameters *a* before and after heterostructures construction

<i>a</i> /Å		
SnO_2	$\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$	Mismatch
14.511	14.84	2.3%

将 3 种掺杂模型的掺杂原子均设置在表面结构第 3 层原子的位置上并加以固定，为了避免表面结构在 *z* 方向上的相互影响将真空层的厚度设置为 20 Å。表面结构的 5 层原子中，靠近真空层的 2 层原子模拟材料的表面，远离真空层的 3 层原子模拟材料的体相部分，从而使计算结果更加贴近实验值。

对 SnSe_2 的原胞进行结构优化，优化之后的晶格参数分别为 $a=3.892$ Å， $c=6.293$ Å，此时原胞的体系能量为 -11.852 eV。在优化原胞结构的基础上切取单层 SnSe_2 结构，为了使得切取的 SnSe_2 单层结构在与 SnO_2 形成异质结构时的晶格失配小于 5%，首先将 SnSe_2 单层结构的晶格矢量方向改变为 $u(1\ 1\ 0)$ ， $v(1\ \bar{1}\ 0)$ ，然后对表面结构进行 $4 \times 1 \times 1$ 的扩胞，得到其超胞结构，为了计算时减小材料在 *z* 方向上的相互影响，将真空层的厚度设置为 20 Å。对单层 SnSe_2 的超胞结构进行结构优化得到的晶格参数分别为 $a=15.23$ Å， $c=23.05$ Å。

郁建元等^[21]，Wang 等^[14]及 Wang 等^[10]的研究

结果表明，F 的理论最佳掺杂原子比例为 3%，Nb 的理论最佳掺杂原子比例为 2%，F、Nb 共掺时 2 种元素掺杂原子比例分别为 4%、2%。

当构建掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 异质结构时，如果将掺杂元素设置在靠近表面 2 层的位置然后对其进行表面弛豫时，由掺杂引起的晶格畸变会使表面 2 层原子发生严重变形甚至导致体系崩溃，因此在构建掺杂模型时，将掺杂元素设置在表面结构第 3 层原子的位置并加以固定。优化后的本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 异质结构如图 2 所示。

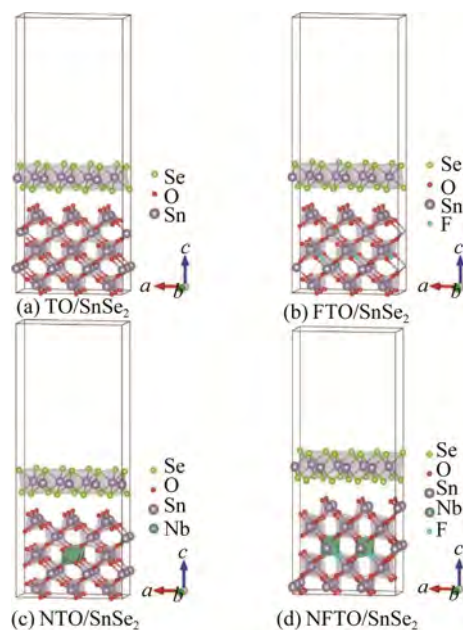


图 2 本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 异质结构模型

Fig. 2 Intrinsic and doped $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ heterostructures models

2 结果与讨论

2.1 电子结构分析

纵坐标以 Fermi 能级为 0 点的能带结构如图 3 所示，图 3a~图 3d 分别为 TO、FTO、NTO 以及 NFTO 与 SnSe_2 构建的异质结构的能带结构图。从图 3 可以看出，4 种不同掺杂的异质结构的带隙值分别为 0.563、-0.245、0.124 eV 和 0.364 eV，且 4 种不同掺杂类型异质结构的能带结构均为间接带隙半导体。

为了分析本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 异质结构体系中各元素对能带的贡献，分别计算了 4 种不同掺杂类型异质结构体系的电子态密度，其结果如图 4 所示。图 4 TDOS 代表每个结构体系的总电子态密度图，其他代表体系内各元素对能带的贡献。由图 4 可以看出，异质结构体系中 Sn 元素的价电子对价带和导带均有贡献且主要分布在远离 Fermi 能级的位置。O 元素的价电子对能带的贡献主要集中在价带

部分且在近 Fermi 能级的位置主要由 O 元素 2p 能级的电子提供。Se 元素的价电子对能带的贡献主要集中在价带部分且在近 Fermi 能级的位置主要由 Se 元素 4p 能级的电子提供。由图 4b 可见, FTO/ SnSe_2 异质结构中, F 元素的价电子对能带的贡献主要在价带部分且在近 Fermi 能级的位置主要由 F 元素 2p 能级的电子提供。由图 4c 可见, NTO/ SnSe_2 异质结构中, Nb 元素 5s 能级的电子对能带结构的贡献几乎为零, 4d 能级的电子对能带的贡献主要在

近 Fermi 能级的导带部分。图 4d NFTO/ SnSe_2 异质结构中各元素对能带的贡献同上。综上所述, 异质结构带隙值减小的原因是体系内 Se 元素与掺杂元素对能带的贡献均集中在靠近 Fermi 能级的位置, 使得异质结构体系内价带顶与导带底相对于表面结构相互靠近所致, 即构成异质结时发生了能带对准, 这也同时导致了在构成异质结时两者的 Fermi 能级均有所改变: 本征及掺杂 SnO_2 的 Fermi 能级上移, 而 SnSe_2 的 Fermi 能级下移。

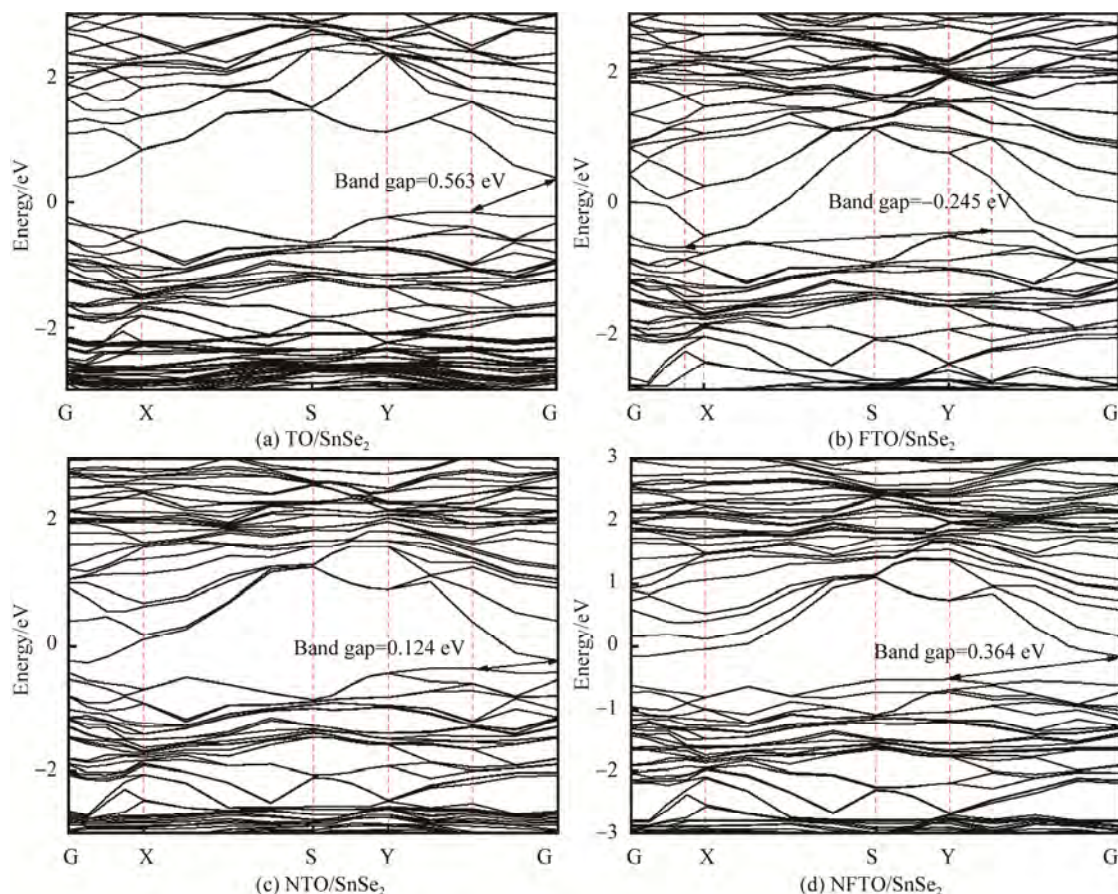


图 3 本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 异质结构能带图

Fig. 3 Energy band diagrams of intrinsic and doped $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ heterostructures

2.2 光学性能分析

计算了不同掺杂类型异质结构在可见光范围内的光吸收和光反射谱, 如图 5 所示。从图 5 可以看出, 无论掺杂哪一种元素, 其异质结构的光吸收不超过 25.0%, 光反射不超过 2.5%。

光学透过率的计算公式

$$\tau + \rho + \sigma = 1 \quad (1)$$

式中: τ 为光学透过率; ρ 为光学反射率; σ 为光学吸收率。由式(1)可知, 本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 异质结构的理论光学透过率均在 80% 以上。

2.3 载流子迁移率

分别计算不同掺杂类型的异质结构的电子有效质量、形变势能以及弹性模量, 并根据式(2)计算载流子迁移率

$$\mu_{2D} = \frac{eh^3 C_{2D}}{k_B T m^* m_d E_1^2} \quad (2)$$

式中: μ_{2D} 为载流子迁移率; m^* 为电子或者空穴在传输方向上的有效质量; T 为温度; k_B 为 Boltzmann 常数; E_1 为沿着传输方向上位于价带顶(VBM)的空穴或者聚于导带底(CBM)的电子的形变势能; m_d 为载流子

的平均有效质量; C_{2D} 为均匀变形晶体的弹性模量; $\hbar$ 为约化 Planck 常数。得到表 4 所示数据。由表 4 可知, TO、FTO、NTO 以及 NFTO 与 SnSe_2 构建的异质结构的迁移率分别为 772.82、5 286.04、2 656.90 $\text{m}^2/(\text{S}\cdot\text{V})$

和 17 724.6 $\text{m}^2/(\text{S}\cdot\text{V})$ 。与本征及掺杂 SnO_2 表面结构和单层 SnSe_2 相比, 异质结构的迁移率明显提升。

计算不同掺杂类型异质结构的平均光吸收和光反射率, 结果如表 3 所示。

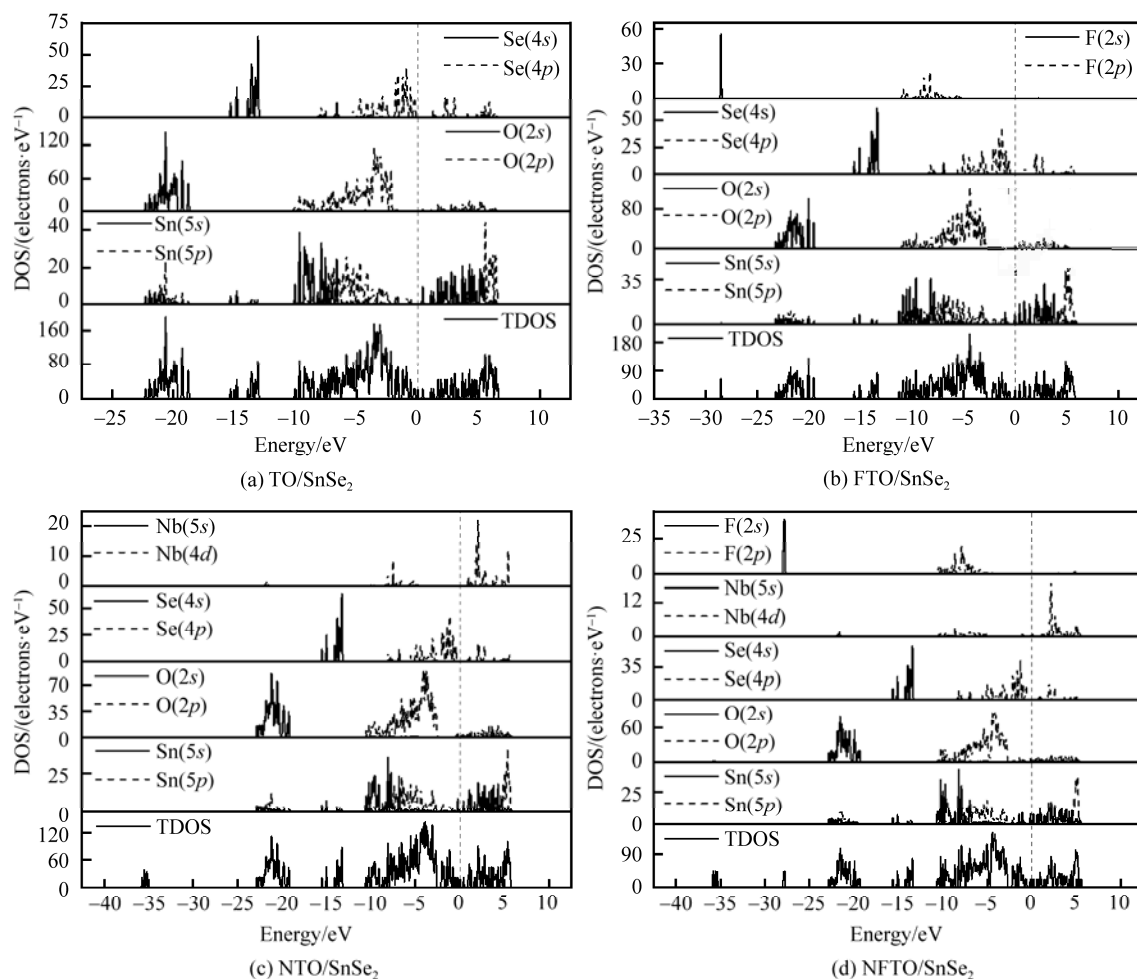


图 4 本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 异质结构的电子态密度图

Fig. 4 Electronic density of states of intrinsic and doped $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ heterostructures

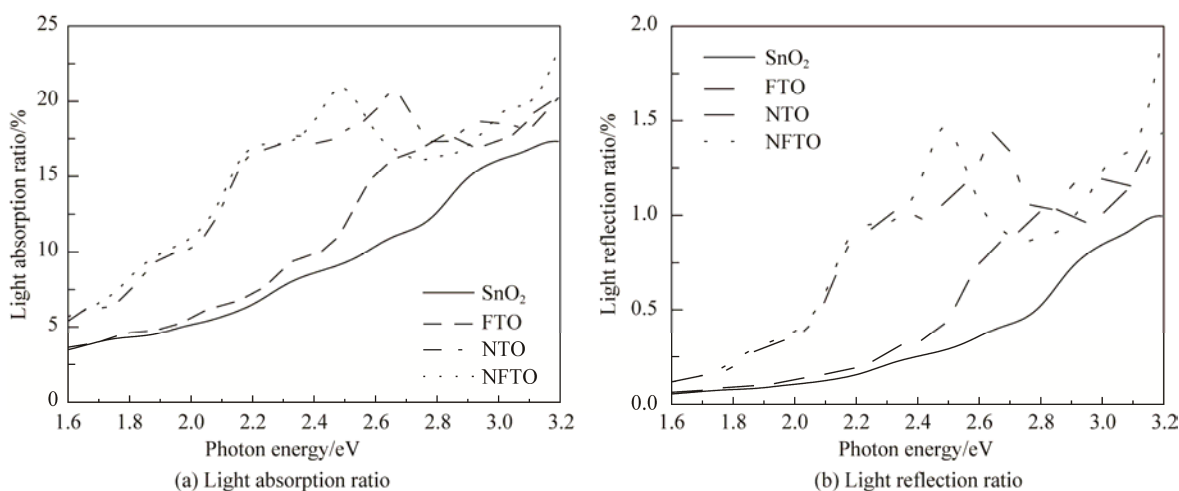


图 5 本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 异质结构在可见光范围内的光学谱

Fig. 5 Optical spectra of intrinsic and doped $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ heterostructures in the visible range

表 3 不同掺杂类型异质结构的平均光吸收和光反射率

Table 3 Average light absorption and light reflectance of heterostructures with different doping type

Type	TO/SnSe ₂	FTO/SnSe ₂	NTO/SnSe ₂	NFTO/SnSe ₂
Light absorption ratio	9.258 35	11.073 30	14.982 91	15.221 36
Light reflection ratio	0.355 12	0.520 69	0.837 75	0.844 234

表 4 本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 4 种不同掺杂类型异质结构导电底电子在 x 轴传输方向上的迁移率Table 4 Mobility of electrons at the bottom of the conduction band of four different doped heterostructures of intrinsic and doped $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ along the x-axis transport direction

Sample	m_x^* (m_e)	m_y^* (m_e)	m_z (m_e)	E_f/J	$C_{2D}/(\text{J}\cdot\text{m}^{-2})$	$\mu_{2D}/(\text{m}^2\cdot\text{S}^{-1}\cdot\text{V}^{-1})$
TO/SnSe ₂	0.31	0.10	0.18	0.880×10^{-19}	244.96	772.82
FTO/SnSe ₂	0.24	0.15	0.19	1.072×10^{-19}	203.19	5 286.04
NTO/SnSe ₂	0.38	0.43	0.40	2.890×10^{-19}	247.42	2 656.90
NFTO/SnSe ₂	0.88	0.39	0.59	0.176×10^{-19}	209.10	17 724.6

m_e is the static mass of the electron, $9.109\ 56\times 10^{-31}$ kg.

2.4 电荷分布

对不同掺杂类型异质结构的静电势进行计算, 结果如图 6 所示。由图 6 可以看出, TO、FTO、NTO 以及 NFTO 与 SnSe_2 构建的异质结构的平衡静电势分别为 5.28、5.12、5.17 eV 和 5.83 eV。图 6 所示虚线左侧的峰值为异质结构中 TO、FTO、NTO 以及 NFTO 表面结构的静电势, 分别为 4.24、4.48、4.32 eV 及 4.97 eV。虚线右侧的底峰值分别为 4 种不同掺杂类型异质结构中单层 SnSe_2 的静电势, 分别为 -9.61、-9.21、-9.42 eV 和 -8.62 eV。由此可以计算出 4 种不同掺杂类型异质结构内部的电势差分别为 13.85、13.69、13.74 eV 和 13.59 eV。由于异质结构体系内部存在电势差, 所以体系内部的电子会在内在电场的作用下向着界面处转移, 形成二维电子气, 由于电子在 2 种材料界面处的运动没有杂质的干扰, 所以提高了体系载流子的迁移率。为了更直观地表示电荷转移, 计算了本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 4 种不同掺杂类型异质结构的差分电荷密度图, 结果如图 7 所示。图 7a~图 7d 分别为 TO、FTO、NTO 以及 NFTO 与 SnSe_2 构建的异质结构的差分电荷密度图。图 7 黄色表示电子增加, 蓝色表示电子减少, 从图 7 可以看出, 电子向着 2 材料的界面处转移。FTO/SnSe₂ 异质结构的电子更多的聚集在单层 SnSe_2 处, 所以并不会形成二维电子气, 其载流子迁移率提高的原因是单层 SnSe_2 内部没有杂质离子的存在而影响电子的迁移率。

2.5 能带排列

使用 p4vasp 对异质结构的能带结构进行轨道分解, 分别得到本征及掺杂 SnO_2 表面结构和单层 SnSe_2 能带在整体能带结构中的相对位置, 结果如图

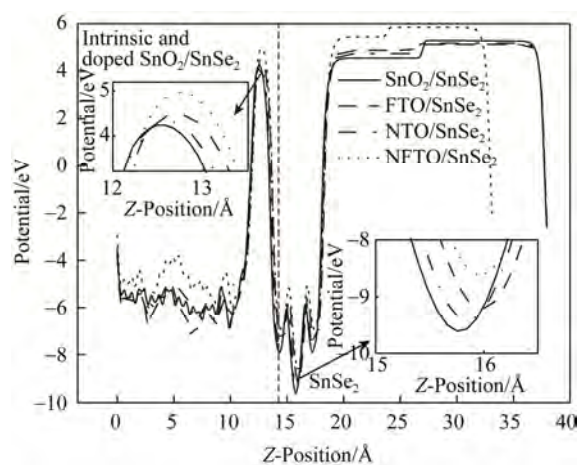
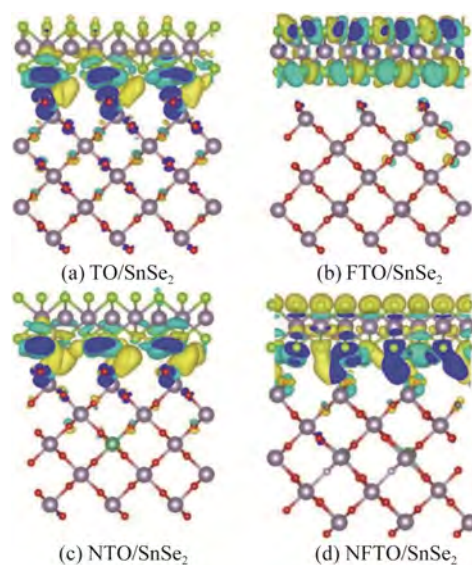
图 6 本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 异质结构的静电势Fig. 6 Electrostatic potential of intrinsic and doped $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ heterostructures

图 7 本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 异质结构的差分电荷密度图
Fig. 7 Differential charge density diagrams of intrinsic and doped $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ heterostructures

8 所示。从图 8 可以看出, 4 种异质结构中本征及掺杂 SnO_2 表面结构价带顶与导带底的能量均小于单层 SnSe_2 , 价带顶的能量差分别为 0.077 2、0.084 7、0.027 8 eV 和 0.083 1 eV, 导带底的能量差值分别为 0.025 8、0.023 1、0.018 5 eV 和 0.055 4 eV, 所以可以推断 4 种异质结构均为 II 型半导体。4 种不同掺

杂类型的异质结构均为 II 型异质结, 所以整体的能带结构中价带顶的能带主要由 SnSe_2 贡献, 导带底的能带主要由 SnO_2 贡献, 这也是在形成异质结构时体系的带隙值会减小的原因。带隙值的减小, 使得异质结构体系中在价带顶的电子更容易跃迁到导带底, 从而提高体系的电学性能。

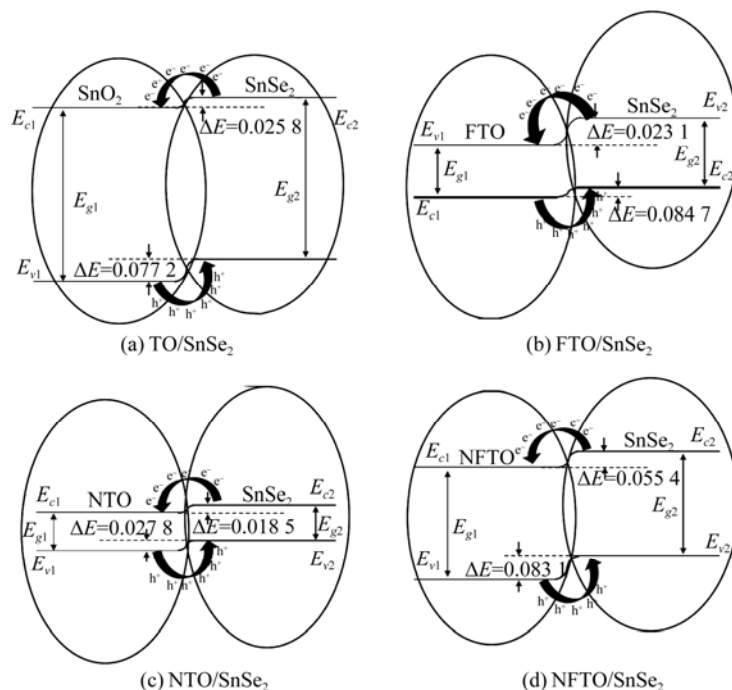


图 8 本征及掺杂 $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ 异质结构的能带排列

Fig. 8 Energy band arrangement of intrinsic and doped $\text{SnO}_2/\text{SnSe}_2$ heterostructures

3 结论

通过对 TO、FTO、NTO 以及 NFTO 与 SnSe_2 构建的异质结构进行第一性原理计算, 得到各异质结构的载流子迁移率分别为 772.82、5 286.04、2 656.90 $\text{m}^2/(\text{S}\cdot\text{V})$ 和 17 724.60 $\text{m}^2/(\text{S}\cdot\text{V})$, 且由各异质结静电势分析和能带排列情况可以知道, 构建异质结能够大幅度调高 FTO 族透明导电薄膜的导电性, 而透过率不会有太大影响, 对相关实验有一定指导意义。

参考文献:

- [1] 刘晓菲, 王小平, 王丽军, 等. 透明导电薄膜的研究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2012, 49(10): 26–35.
LIU Xiaofei, WANG Xiaoping, WANG Lijun, et al. Laser Optoelectron Prog (in Chinese), 2012, 49(10): 26–35.
- [2] YANG W H, YU S H, ZHANG Y, et al. Properties of Sb-doped SnO_2 transparent conductive thin films deposited by radio-frequency magnetron sputtering[J]. Thin Solid Films, 2013, 542: 285–288.
- [3] 王立坤, 郁建元, 王丽, 等. 掺杂对二氧化锡薄膜光电性能的影响[J]. 硅酸盐学报, 2018, 46(4): 590–597.

WANG Likun, YU Jianyuan, WANG Li, et al. J Chin Ceram Soc, 2018, 46(4): 590–597.

- [4] YU S H, LI L X, SUN Z, et al. Characteristics of transparent conducting W-doped SnO_2 thin films prepared by using the magnetron sputtering method[J]. J Am Ceram Soc, 2015, 98(4): 1121–1127.
- [5] YANG J K, ZHAO H L, ZHU Y, et al. First-principle study of structural and electronic properties of Ti-doped SnO_2 [J]. Adv Mater Res, 2013, 634–638: 2545–2549.
- [6] TURGUT G. Effect of Ta doping on the characteristic features of spray-coated SnO_2 [J]. Thin Solid Films, 2015, 594: 56–66.
- [7] LIN W, ZHANG Y F, LI Y, et al. Structural characterizations and electronic properties of Ti-doped $\text{SnO}_2(110)$ surface: A first-principles study[J]. J Chem Phys, 2006, 124(5): 054704.
- [8] GOKULAKRISHNAN V, PARTHIBAN S, JEGANATHAN K, et al. Investigations on the structural, optical and electrical properties of Nb-doped SnO_2 thin films[J]. J Mater Sci, 2011, 46(16): 5553–5558.
- [9] 王轩, 梁波, 邸庆银, 等. 气溶胶辅助 CVD 法制备 F 掺杂 SnO_2 薄膜及其性能[J]. 硅酸盐学报, 2019, 47(2): 243–249.
WANG Xuan, LIANG Bo, DI Qingyin, et al. J Chin Ceram Soc, 2019, 47(2): 243–249.
- [10] WANG L K, YU J Y, NIU X Y, et al. Effect of F and Nb co-doping on structural, electrical and optical properties of spray deposited tin oxide thin films[J]. Thin Solid Films, 2018, 649: 147–153.
- [11] TURGUT G, SONMEZ E, AYDIN S, et al. The effect of Mo and F

- double doping on structural, morphological, electrical and optical properties of spray deposited SnO_2 thin films[J]. *Ceram Int*, 2014, 40(8): 12891–12898.
- [12] 邱茹蒙. 氟钨共掺 SnO_2 低辐射薄膜光学和电学性能的研究[D]. 秦皇岛: 燕山大学, 2019.
- QIU Rumeng. Investigation on optical and electrical properties of fluorine and tungsten co-doped tin oxide low emission films (in Chinese, dissertation). Qinhuangdao: Yanshan University, 2019.
- [13] 付晨. 氟钨共掺杂二氧化锡薄膜低辐射性能研究[D]. 秦皇岛: 燕山大学, 2019.
- FU Chen. Investigation of low emissivity properties of fluorine and tantalum co-doped tin oxide films (in Chinese, dissertation). Qinhuangdao: Yanshan University, 2019.
- [14] WANG G, WANG L K, ZHU Y, et al. Insight into electronic structure and optical properties of Nb and F co-doped SnO_2 with hybrid functional theoretical method[J]. *Ceram Int*, 2020, 46(8): 10341–10347.
- [15] PINEIZ T F, DE MORAIS E A, SCALVI L V A, et al. Interface formation of nanostructured heterojunction SnO_2 : Eu/GaAs and electronic transport properties[J]. *Appl Surf Sci*, 2013, 267: 200–205.
- [16] MARTÍNEZ-ESCOBAR D, RAMACHANDRAN M, SÁNCHEZ-JUÁREZ A, et al. Optical and electrical properties of SnSe_2 and SnSe thin films prepared by spray pyrolysis[J]. *Thin Solid Films*, 2013, 535: 390–393.
- [17] SARITHA K, PHANEENDRA REDDY G, RAMAKRISHNA REDDY K T. Studies on physical properties of SnSe_2 thin films grown by a two-stage process[J]. *Mater Today Proc*, 2016, 3(10): 4128–4133.
- [18] SARITHA K, SURYANARAYANA REDDY A, RAMAKRISHNA REDDY K T. Investigation on optical properties of SnSe_2 thin films synthesized by two - stage process[J]. *Mater Today Proc*, 2017, 4(14): 12512–12517.
- [19] GUILLÉN C, MONTERO J, HERRERO J. Characteristics of SnSe and SnSe_2 thin films grown onto polycrystalline SnO_2 -coated glass substrates[J]. *Phys Stat Sol (a)*, 2011, 208(3): 679–683.
- [20] MARTÍNEZ-ESCOBAR D, RAMACHANDRAN M, SÁNCHEZ-JUÁREZ A, et al. Optical and electrical properties of SnSe_2 and SnSe thin films prepared by spray pyrolysis[J]. *Thin Solid Films*, 2013, 535: 390–393.
- [21] 郁建元, 王立坤, 牛孝友, 等. FTO 薄膜电子结构和光学性质的 PBE0 方法研究[J]. 燕山大学学报, 2018, 42(1): 38–43.
- YU Jianyuan, WANG Likun, NIU Xiaoyou, et al. J Yanshan Univ (in Chinese), 2018, 42(1): 38–43.