



# اثر ناخالصی‌های متفاوت پلاتین، آنتیموان، تیتانیوم، مس و آهن بر ویژگی ساختاری و الکترونی نانولایه دی‌اکسید قلع با استفاده از اصول محاسبات اولیه

سمیه ناصری پور تکلو و محمود جعفری\*

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

**چکیده:** در پژوهش حاضر، به بررسی ویژگی ساختاری و الکترونی نانولایه دی‌اکسید قلع با استفاده از بسته‌ی محاسباتی کوانتوم اسپرسو بر مبنای نظریه‌ی تابعی چگالی، به کمک رهیافت شبه پتانسیل فوق نرم و تقریب گرادیان تعمیم یافته، پرداخته‌ایم. ساختار خالص این مدل از دی‌اکسید قلع نیم‌رساناست. هدف از این پژوهش، بررسی اثر ناخالصی‌هایی مانند مس، آنتیموان، تیتانیوم، پلاتین و آهن (در بخش مغناطیسی) بر خواص ذکر شده‌ی نانولایه دی‌اکسید قلع است. بررسی طول پیوندها، ساختار نواری و چگالی حالات نشان می‌دهند که افزودن ناخالصی‌های پلاتین، آنتیموان، تیتانیوم و مس باعث بهبود رسانندگی نانولایه دی‌اکسید قلع می‌شود؛ افزودن آهن همچنین، باعث ایجاد خاصیت مغناطیسی در آن می‌شود.

**واژگان کلیدی:** نانولایه دی‌اکسید قلع، اثر ناخالصی، ویژگی الکترونی و ساختاری

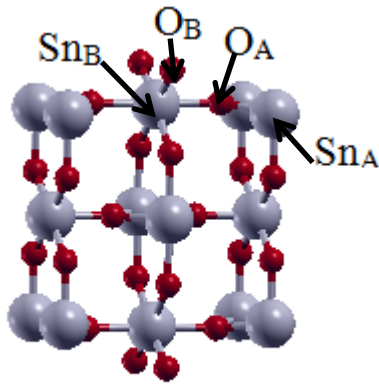
\*jafari@kntu.ac.ir

متعلق به خانواده مواد اکسیدهای شفاف TCO<sup>1</sup> است که دارای مقاومت الکتریکی پایین، ثابت دی‌الکتریک و شفافیت نوری بالا در ناحیه مرئی طیف الکترومغناطیسی است. این ویژگی سبب شده است که دی‌اکسید قلع کاربردهای بسیاری مانند استفاده در الکتروسلول خورشیدی، دیودهای نشری نوری، صفحات نمایشگری تخت، لایه‌های پنجره بازگرداننده گرما و دیگر قطعات اپتوالکتریک داشته باشد [۶ و ۵]. به تازگی مطالعات بر لایه‌های نازک شفاف و رسانا به دلیل کاربردهای وسیعی که در زمینه‌های اپتوالکتریک دارند، توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده است [۷-۹]. اکسیدهای شفاف رسانا بدلیل داشتن ضریب عبور نوری بالا در بازه نور مرئی به عنوان پنجره‌های نور مرئی و همچنین، داشتن مقاومت الکتریکی پایین، به‌عنوان رسانای خوب برای اتصال در مدارهای الکتریکی به حساب می‌آیند [۱۰]. دی-اکسید قلع یک نیم‌رسانا نوع n با پهنای نوار بزرگ دارای مقاومت

## ۱- مقدمه

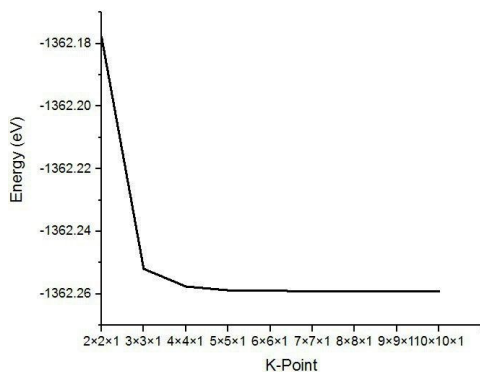
SnO<sub>2</sub> ماده نیم‌رسانای نوع n با گاف نواری ۲ تا ۴ الکترون ولت، یک جامد دیامغناطیس دوخصلتی است، جرم مولکولی این پودر سفیدرنگ ۱۵۰٫۷۰۸g/mol و نقطه ذوب آن ۱۱۲۰ °C است [۱]. فیلم نازک، SnO<sub>2</sub> با توجه به کمبود اکسیژنی که دارد نیم‌رسانای شفاف نوع n با گاف نواری پهن حدود (۳٫۸-۴٫۳) است [۲-۴]. اکسید قلع بخاطر ویژگی‌های خاصی از قبیل هدایت الکتریکی خوب و شفافیت بالا کاربردهای فراوانی در صنایع متفاوت مانند میکروالکترونیک و صنعت سرامیک، صنعت شیشه‌گری و لعابکاری و... از خود نشان داده است. در برخی کاربردها از خاصیت رسانای الکتریکی بودنش استفاده می‌شود و در بعضی کاربردهای دیگر خاصیت شفاف بودن این ماده اهمیت دارد و در بعضی مواقع هر دو خاصیت بکار می‌آید. دی‌اکسید قلع

<sup>1</sup> Transparent Conducting Oxide



شکل ۱: نانو لایه دی اکسید قلع

انرژی قطع بر پایه امواج تخت ۹۵ eV تنظیم شد (در شکل‌های ۳ و ۲ آزمون همگرایی انرژی و بردار موج مشخص است)، منطقه بریلوئن کاهش ناپذیر به روش مونخورست پاک با تعداد نقاط 5\*5\*1 بهینه شد. پایدارترین سطح از ساختار روتایل گونه، SnO<sub>2</sub> سطح (۱۱۰) است [۲۲] سطح هندسی ساختار را بصورت لایه‌ای ساخته و فضای خلا بین سطوح 18 Å برای جلوگیری از تداخلات بین تصاویر تناوبی انتخاب شد. در این مدل ساختاری اتم‌ها در لایه‌های پایینی در موقعیت‌های توده ثابت هستند [۲۳].



شکل ۲: آزمون همگرایی بردار موج (k-point)

ویژه حدود ( $10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$ ) و شفافیت بالایی ( $\sim 90\%$ ) در ناحیه مرئی است [۱۱]. ویژگی الکتریکی، نوری و ساختاری SnO<sub>2</sub> و کاربرد آن در اکسیدهای شفاف و رسانا و استفاده از آن در حسگرهای گازی [۱۲]، ترانزیستورهای لایه نازک [۱۳]، وسایل اپتوالکتریکی [۱۴]، صفحات پنل کریستال [۱۵] و به عنوان الکتروود و پنجره نوری در سلول‌های خورشیدی [۱۶ و ۱۷] توجه بسیاری را به خود جلب کرده است [۱۸]. به دلیل آنکه هرچه خاصیت رسانایی دی اکسید قلع بیشتر شود کاربرد بهتری خواهد داشت بدنبال ناخالصی‌هایی بودیم که سبب بهبود این خاصیت شود، همچنین، بیشتر در ساختارهای دی اکسید قلع امتحان شده باشند. از این رو، آنتیموان، مس و پلاتین را بجای اتم قلع جانشین کردیم، اتم تیتانیوم چون از نظر آرایش الکترونی شبیه به اتم قلع است (چهار الکترون در لایه ظرفیت خود دارد) به هنگام جانشین شدن با قلع ویژگی مشابه را نشان می‌دهد.

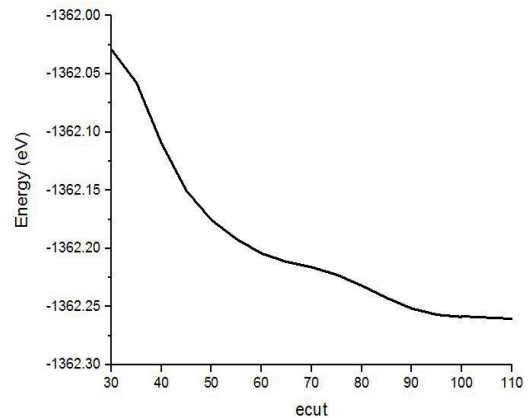
## ۲- محاسبات

### ۲-۱- بررسی ویژگی ساختاری

محاسبات در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و حل معادلات کوهن-شم با پایه‌های موج تخت با بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو [۱۹]، با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و بهینه‌سازی سلول خودسازگار با شبه پتانسیل فوق نرم (PW91) انجام شد [۲۰]. در این پژوهش، نانولایه‌ی دی‌اکسید قلع را شبیه‌سازی کردیم، (شکل ۱). پارامترهای شبکه قبل از بهینه‌سازی و با استناد به مقاله [۲۱] مقدارهای  $a=3.186 \text{ \AA}$  و  $b=6.69 \text{ \AA}$  است.

جدول ۱: طول پیوند بین اتم ها پس از بهینه سازی ساختار

طول پیوند	پس از بهینه سازی (Å)
SnA-OA	۲,۰۵۴۸
SnA-OB	۲,۰۸۹۴
SnB-OA	۲,۱۷۶۴
SnB-OB	۱,۹۹۲۷
b- OA <sup>‡</sup>	۲,۰۷۳۵
Sb- OB	۱,۹۸۶۸
Cu- OA	۲,۱۷۶۱
Cu- OB	۱,۹۲۳۷
Ti- OA	۲,۱۱۷۰
Ti- OB	۱,۸۶۷۸
Pt- OA	۲,۰۹۱۸
Pt- OB	۲,۰۲۶۱
SnA- SnA, SnB- SnB	۳,۱۷۸۶
[۲۳]Sn(bulk)-Sn	۳,۲۵۰۰
[۲۳]Sn-O(bulk)	۲,۱۰۰۰



شکل ۳. آزمون همگرایی انرژی قطع (ecut)

### ۳- بحث و نتایج

محاسبات مربوط به طول پیوندها پس از بهینه‌سازی در جدول ۱ آمده است، طول پیوندهای مربوط به حالت بالک این ساختار از مقاله [۲۴] استناد شده است. همانطوریکه در کار پیشین [۲۵] افزایش غلظت ناخالصی آنتیموان را مورد بررسی قرار دادیم، در این مقاله توجه ما به جایگزینی اتم های متفاوت به عنوان ناخالصی است و به دنبال بهبود ویژگی رسانندگی ساختار نانولایه دی-اکسید قلع هستیم و برای این منظور از عناصری برای جانشینی استفاده کردیم که بیشتر در حالت بالک استفاده شده بود، مشاهده می‌کنیم طول پیوند مربوط به اتم قلع که در مرکز ( $Sn_B$ ) قرار دارد (در واقع اتم‌های ناخالص را به این جایگاه می‌افزاییم) تغییری بیشتری دارد که کامل طبیعی است، بیشترین تغییرات طول پیوند مربوط به افزودن تیتانیوم و کمترین تغییرات مربوط به افزودن پلاتین است.

#### ۳-۱- بررسی ویژگی الکترونی

از ساختار نواری می‌توان اطلاعاتی را در مورد ماهیت بلوراز لحاظ فلز یا غیر فلز بودن، اندازه گاف انرژی در صورت وجود و نوع آن از لحاظ مستقیم یا غیر مستقیم بودن بدست آورد.

#### ۳-۱-۱- حالت خالص

همانطور که از ساختار نواری شکل ۴ (الف) در حالت خالص نانو لایه دی اکسید قلع مشخص است این ساختار بدون افزودن ناخالصی نیمه رساناست و دارای گاف نواری  $0.84 \text{ eV}$  است. در تایید ساختار نواری چگالی حالات کل از نانولایه دی اکسید قلع شکل ۴ (ب) را مشاهده می‌کنید که کاملاً با ساختار نواری مطابقت دارد و گاف نواری باریک در آن مشخص می‌باشد.

#### ۳-۱-۲- افزودن ناخالصی آنتیموان

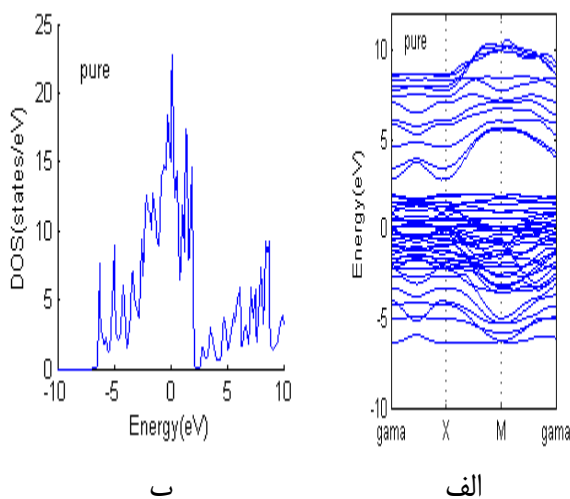
دو جایگاه در سطح این مدل از دی‌اکسید قلع برای افزودن ناخالصی مناسب می‌باشند: ۱- اتم قلع در گوشه ساختار ( $Sn_A$ ) و

گاف نواری و افزایش چگالی حالات دلیل بهبود ویژگی رسانایی و در واقع خاصیت فلزی ساختار هستند. دلیل ایجاد این خاصیت تزریق الکترون به درون نوار رسانش از طریق الکترون‌های اضافی پلاتین که در ابتدا به آن اشاره شد، است.

## ۴-۱-۳- ناخالصی تیتانیوم

اتم قلع در لایه ظرفیت خود ۴ الکترون دارد انتظار می‌رود جایگزین شدن اتمی که در لایه ظرفیت خود ۴ الکترون دارد، با اتم قلع ساختاری را مشابه با حالت خالص ایجاد کند و همانطور که از شکل‌های ساختار نواری شکل ۴ (چ) و چگالی حالات شکل (و) مشخص است مانند حالت خالص پس از افزودن تیتانیوم ساختار لایه‌ای نیم‌رسانا باقی می‌ماند و گاف انرژی ۰٫۹۱ eV گواه بر این ادعا است. ولی در مقایسه با حالت خالص خاصیت نیم‌رسانایی بهبود یافته است.

بررسی ساختارهای نواری و چگالی حالات کل اتم‌های متفاوت پس از جانشین شدن بجای اتم قلع نشان داد که ناخالصی آنتیموان بیشترین تغییر را در ساختار ایجاد کرده است. بنابراین، گزینه مناسبتری برای بهبود خاصیت رسانایی ساختار است، میزان تاثیر مس و پلاتین تقریباً به یک اندازه بوده و تیتانیوم باعث بهبود خاصیت نیم‌رسانایی می‌شود.

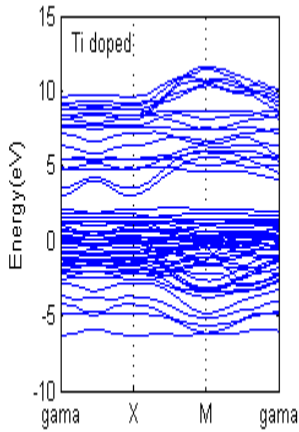


۲- اتم قلع در مرکز ( $Sn_E$ ). پس از بهینه سازی ساختارها دریافتیم جایگزین کردن ناخالصی در مرکز، ساختار پایدارتری را ایجاد می‌کند، لذا محاسبات مربوط به جاننشینی ناخالصی با اتم قلع در این جایگاه را گزارش کرده‌ایم. شکل ۴ (پ و ت) مربوط به افزودن ناخالصی آنتیموان است. همانطور که کاملاً مشخص است، با ناخالصی آنتیموان گاف انرژی کامل از بین رفته و نوارهای انرژی سطح فرمی را قطع می‌کنند در واقع آنتیموان باعث بهبود رسانایی ساختار می‌شود.

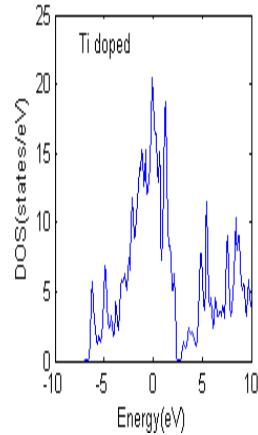
## ۳-۱-۳- ناخالصی مس و پلاتین

پس از افزودن ناخالصی مس و پلاتین همانطور که از نمودارهای ساختار نواری و چگالی حالات مشخص است خاصیت رسانایی بهبود یافته است و تغییرات در افزودن این دو ماده به نانو لایه تقریباً یکسان است، اتم مس با آرایش الکترونی  $[Ar] 3d^{10}4s^1$  یک الکترون در لایه ظرفیت خود دارد، هنگامی که جایگزین اتم قلع که چهار الکترون در لایه ظرفیت خود دارد می‌شود، پس از هشتایی شدن آرایش الکترونی اتم‌ها در لایه ظرفیت، اتم مس؛ بصورت  $Cu^{+2}$  تغییر می‌کند، به این معنی که دو حفره در ساختار پدیده آمده، و ساختار کامل ناپایدار می‌شود. همانطور که از نمودار ساختار نواری شکل ۴ (ث) مشخص است، نوارهای انرژی در باند ظرفیت و رسانش باهم تلاقی دارند و همدیگر را قطع می‌کنند، به بیان دیگر گاف از بین رفته و خاصیت فلزی در ساختار ایجاد می‌گردد، چگالی حالات کل نانولایه دی‌اکسید قلع پس از افزودن مس در شکل ۴ (خ) نشان داده شده است.

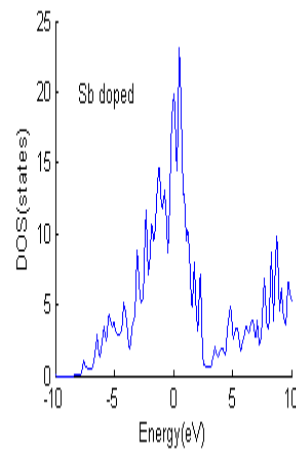
پلاتین با آرایش الکترونی  $[Xe] 4f^{14}5d^76s^2$  دارای ۷ الکترون در لایه ظرفیت خود است، در واقع ۳ الکترون بیشتر از اتم قلع در لایه ظرفیت خود دارد، بنابراین، وقتی بجای قلع در ساختار نانولایه دی‌اکسید قلع قرار می‌گیرد پس از هشتایی شدن و پیوند با اتم‌های اکسیژن ۳ الکترون بصورت آزاد باقی می‌ماند، با توجه به نمودارهای ساختار نواری و چگالی حالات کل از مدل نانولایه دی‌اکسید قلع همراه با ناخالصی پلاتین شکل ۴ (ج و ح)، مشاهده می‌شود که نوارهای انرژی در نمودار ساختار نواری سطح فرمی را قطع کرده و گاف نواری کامل از بین رفته است. در نمودار چگالی حالات کل نیز، که نمودار ساختار نواری را تایید می‌کند، شاهد افزایش چگالی حالات در نزدیکی سطح فرمی هستیم، نبود



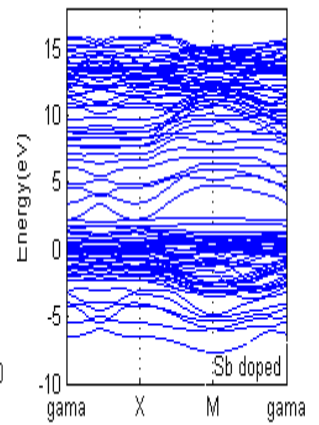
ج



م



ت

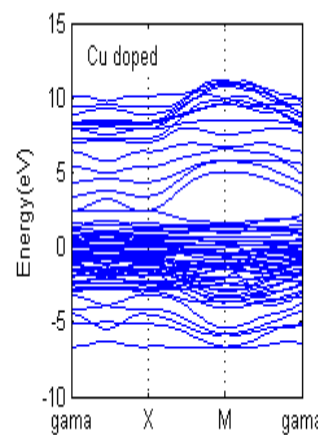


پ

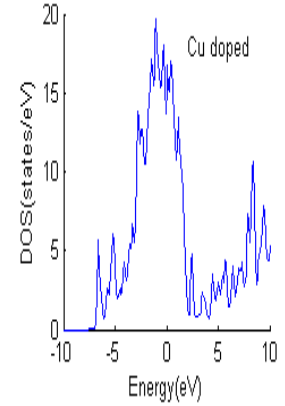
شکل ۴: الف) ساختار نواری حالت خالص نانو لایه دی اکسید قلع، ب) چگالی حالات کل از نانو لایه دی اکسید قلع، پ) ساختار نواری پس از افزودن ناخالصی آنتیموان، ت) چگالی حالات کل پس از افزودن ناخالصی آنتیموان، ث) ساختار نواری پس از افزودن ناخالصی مس، خ) چگالی حالات کل پس از افزودن ناخالصی مس، ج) ساختار نواری پس از افزودن ناخالصی پلاتین، چ) ساختار نواری پس از افزودن ناخالصی تیتانیم، م) چگالی حالات کل پس از افزودن ناخالصی تیتانیم

### ۲-۳- بررسی ویژگی مغناطیسی

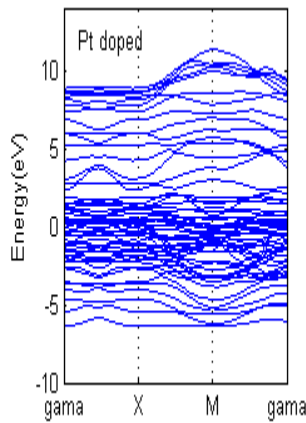
در این بخش، ابتدا ساختار خالص نانولایه دی اکسید قلع را از نظر مغناطیسی مورد مطالعه قرار دادیم، بدین منظور ساختارهای نواری با در نظر گرفتن اسپین بالا و پایین برای الکترون ها و چگالی حالات دی اکسید قلع خالص شکل ۵ (الف، ب و پ) مورد بررسی قرار دادیم، همانطور که از شکل قابل مشاهده است، چگالی حالات کامل متقارن و بیانگر غیر مغناطیسی بودن دی اکسید قلع در نانولایه است. همانطوریکه از ساختار نواری در حالت خالص مشخص است گاف نواری با در نظر گرفتن اسپین بالا و پایین برای الکترون ها هیچ تغییری نمی کند، این نشان می دهد که ساختار خالص مدل لایه ای در این حالت کاملا غیر مغناطیسی است. همچنین، چگالی حالات کل از ساختار خالص مدل لایه ای تاییدی بر غیر مغناطیسی بودن ساختار در حالت خالص است.



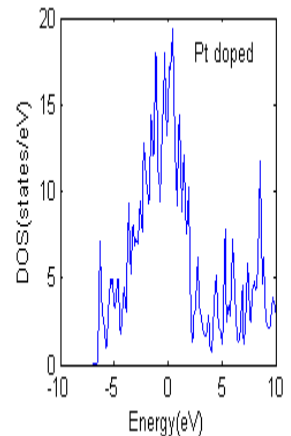
ث



خ



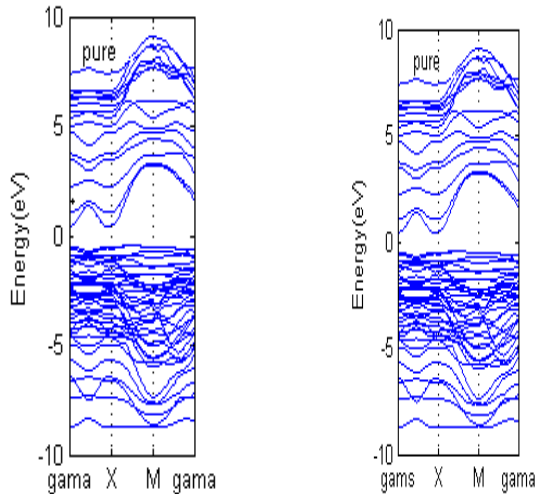
ج



ح

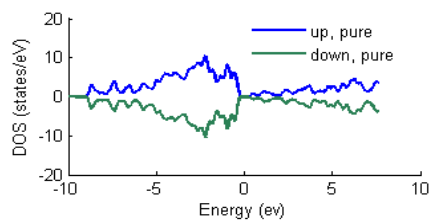
## ۱-۲-۳- ناخالصی آهن

بهبود خاصیت رسانایی ساختار است. ناخالصی های مس و پلاتین از نظر تاثیر به یک اندازه موثر بوده ولی ناخالصی تیتانیوم باعث بهبود خاصیت نیم رسانایی می شود. دربخش مغناطیسی افزودن آهن باعث ایجاد خاصیت مغناطیسی با مغناطشی برابر با ۳,۹۸ مگنتون بوهر می شود.

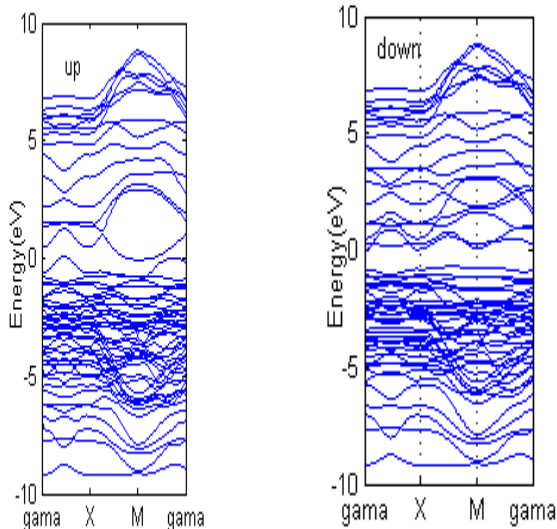


الف

ب



پ



ت

ث

آهن یک اتم مغناطیسی معمولی و انتخاب ایده آلی برای مغناطیسی کردن ساختار دی اکسید قلع است. طول پیوند بین اتمها پس از افزودن آهن در جدول ۲ مشخص شده است، همانطوریکه از نمودارهای ساختار نواری و چگالی حالات مشخص است ساختار نانولایه دی اکسید قلع مغناطیسی شده است.

جدول ۲: طول پیوند بین اتمها بعد از بهینه سازی ساختار بخش ویژگی

مغناطیسی	
طول پیوند	پس از بهینه سازی ( $\text{\AA}$ )
$Fe-O_A$	۲,۰۷۸۴
$Fe-O_B$	۱,۸۳۱۰

مهمترین نتیجه ای که می توان از جداسدگی این نوارها در ساختار نواری شکل ۵ (ت و ث) گرفت این است که خاصیت مغناطیسی پس از افزودن اتم آهن در ساختار ایجاد شده است. اتم آهن ویژگی الکترونی دی اکسید قلع را تحت تاثیر قرار داده که برای توجیه آن می توان از اربیتال های اشباع نشده موجود در فلز واسطه یاد کرد، از چگالی حالات کل پس از افزودن آهن شکل ۵ (م) و مقایسه آن با چگالی حالات کل در حالت خالص شکل ۵ (پ) مغناطیسی شدن آن کاملا مشخص است. مقدار ممان مغناطیسی بدست آمده برای این ساختار ۳,۹۸ مگنتون بوهر می باشد که توافق خوبی با کار دیگران [۲۶] دارد.

## ۴- نتیجه گیری

در این پژوهش، ویژگی ساختاری و الکترونی نانولایه دی اکسید قلع با استفاده از بسته محاسباتی اسپرسو بر مبنای نظریه تابعی چگالی، به کمک شبه پتانسیل فوق نرم و تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شد.

مطالعه ویژگی ساختاری و الکترونی با بررسی ساختارهای نواری منجر به کاهش فاصله نوارها و در برخی موارد از بین رفتن گاف انرژی گردید. با بررسی چگالی حالات افزایش چگالی حالات در اطراف سطح فرمی مشاهده شد. نتایج بدست آمده با افزایش ناخالصی نشان می دهد که ناخالصی آنتیموان گزینه مناسبی برای

[13] R.E. Presley, C.L. Munsee, C.H. Park, D. Hong, J.F. Wager, and D. A. Keszler; "Tin oxide transparent thin-film transistors" J. Phys. D: Appl. Phys. **37** (2014) 2810-2813.

[14] E. Elangovan and K. Ramamurthi; "Optoelectronic properties of spray deposited SnO<sub>2</sub>: F thin films for window materials in solar cells"; Journal of Optoelectronics and Advanced Materials **5**, No. 1 (2003) 45-54.

[15] K.H. Kim, N.M. Park, T.Y. Kim, K.S. Cho, J. I. Lee, H. Y. Chu and G. Y. Sung; "Indium Tin Oxide Thin Films Grown on Polyethersulphone (PES) Substrates by Pulsed-Laser Deposition for Use in Organic Light-Emitting Diodes"; Proc. SPIE 5740, 'Projection Displays XI', 145-150, 2005.

[16] S. J. Ikhmayies; "Production and characterization of CdS/CdTe thin film photovoltaic solar cells of potential industrial use"; Amman, University of Jordan, 2002.

[17] W. H. Bloss and W. H. Schock CHOCK; "CdS-CuxS thin film solar cells. In: Photovoltaic and photo electrochemical solar energy conversion";

New York and London, Nato Advanced Study Institute Series, Plenum Press(1980)117-156.

[18] V. Geraldo, S. L. V. de Andrade, E.A. de Moraes, C. V. Santilli, S. H. Pulcinelli; "Sb doping effect and oxygen adsorption in SnO<sub>2</sub> thin films deposited via sol-gel"; Mat. Res. **6**, 451-456, 2003.

[19] Internet ; <http://www.quantumespresso.org>.

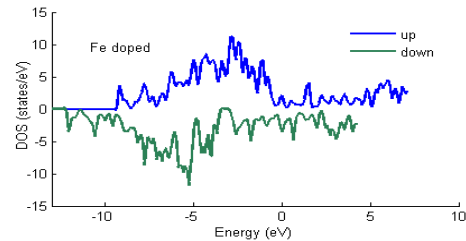
[20] Zhang, Yingkai, and Weitao Yang. "Comment on "Generalized gradient approximation made simple". Physical Review Letters 4077(1114): 410

[21] Bouamra, F., et al. "First principles calculations of magnetic properties of Rh-doped SnO<sub>2</sub> (110) surfaces. Applied Surface Science" 261, 71-77, 2013.

[22] Sun, Chenghua, et al. "Formation energies of low-indexed surfaces of tin dioxide terminated by nonmetals. Solid State Communications 150711, 159-160, 2010.

[23] Xue, Y. B., and Z. A. Tang. "Density functional study of the interaction of CO with undoped and Pd doped SnO<sub>2</sub> (110) surface." Sensors and Actuators B: Chemical 13471, 104-112, 2001.

[24] Robina, A., et al. "Electronic structure and bonding of small Pd clusters on stoichiometric and reduced SnO<sub>2</sub> (110) surfaces." Vacuum 106, 86-93, 2014.



خ

شکل ۵: ساختار نواری با در نظر گرفتن الف) اسپین رو به بالا، ب) اسپین رو به پایین برای الکترون‌ها پ) چگالی حالات کل دی‌اکسید قلع در حالت خالص، ت) اسپین رو به بالا، ث) اسپین رو به پایین برای الکترون‌ها خ) چگالی حالات کل دی‌اکسید قلع پس از افزودن آهن.

## مراجع

- [1] <http://en.Wikipedi.org/Wiki/Tindioxide>, 2008.
- [2] k. I. chopra. et al. Thin Solid Films 102, 1-10, 1983.
- [3] T. J. Coutts, et al., MRS. Bull. 25, 58, 2000.
- [4] Zhang, Wenjing, Zhiye Lin, Hanxiao Li, Fang Wang, Yujie Wen, Meng Xu, Yang Wang et al. "Surface acidity of tin dioxide nanomaterials revealed with 31 P solid-state NMR spectroscopy and DFT calculations." RSC Advances 11, no. 40 (2021): 25004-25009.
- [5] B. Matthias, Ulrike Diebold, Progress in Surface Science 79, 47-154, 2005.
- [6] C. Sevik, and C. Bulutay, phy. Rev. B74,193201, 2006.
- [7] B. Thangaraju; Thin Solid Films **402**, 71, 2002.
- [8] P.S. Patil; Mater. Chem. Phys. **59**, 185-200, 1999.
- [9] A.L. Dawar and J.C. Joshi; J. Mater. Sci. **19**, 1-10, 2001.
- [10] F.L. Rashid, M.A. Eleiwi, and H.A. Hoshi; International Journal of Innovative Research in Engineering & Science **6**, 2, 66-70. 2013.
- [11] A. E. Rakhshani, Y. Makdisi, and H.A. Ramzaniyan; "Electronic and optical properties of fluorine-doped tin oxide films"; J. Appl. Phys. **83**, No. 2 (1998) 1049-1057.
- [12] P. Montmeat; "Thin film membranes for the improvement of gas sensor selectivity" École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne (ENSMSE): Graduate School for Science and Technology, France, 1999.

- [25] M. Jafari, S. Naseripour Takallo, Ab Initio Electronic Structure Investigation of Antimony-Doped SnO<sub>2</sub> (110) Nanosheet, Iran J Sci Technol Trans Sci , 45:745–751, 2021.
- [26] S. Idrissi, L. Bahmad, and A. Benyoussef. "Electronic properties of the Rutile-type dioxide SnO<sub>2</sub> material doped by sulfur element: DFT study." arXiv preprint arXiv:2108.05156, 2021.





# Effect of different impurities Pt, Sb, Ti, Cu, and Fe on structural and electronic properties of SnO<sub>2</sub> nanolayer from first-principles methods

S. Naseripourtakallo,, M. Jafari\*

Department of Physics, K.N. Toosi University of Technology

**Abstract:** In the present research, the structural and electronic properties of SnO<sub>2</sub> nanolayer have been investigated using Quantum ESPRESSO integrated suite based on density-functional theory using ultrasoft pseudopotential approach and the generalized-gradient approximation. The pure structure of this slab model of SnO<sub>2</sub> is semiconductor. The aim of this research is to investigate the effect of the impurities Pt, Sb, Ti, Cu, and Fe (in the magnetic part) on the aforementioned properties of SnO<sub>2</sub> nanolayer. Examining the related bond lengths, band structures and density of states indicate that adding Pt, Sb, Ti, and Cu impurities enhances the conductivity of SnO<sub>2</sub> nanolayer; adding Fe impurity also induces magnetic properties to the nanolayer.

**Keywords:** Tin dioxide nanolayer, Effect of impurity, Electronic and structural properties.