

二维 BX(X=S, Se, Te) 结构预测与性质的第一性原理研究^{*}

濮春英^{1†}, 周大伟¹, 吕林霞¹, 王卓², 唐鑫³

1. 南阳师范学院, 物理与电子工程学院, 南阳 473061;

2. 南阳师范学院, 机械电子工程学院, 南阳 473061;

3. 桂林理工大学, 材料科学与工程学院, 桂林 541004

收稿日期: 2019-02-15; 接收日期: 2019-04-18

【摘要】 采用基于粒子群优化算法的结构预测程序 CALYPSO 结合密度泛函理论的 VASP 软件包, 预测得到二维 BX(X=S, Se, Te) 的最低能量结构, 该结构是由 B 和 X 原子形成的双层褶皱的六角密堆积结构, 层与层之间较强的 B-B 键是稳定结构的关键. 凝聚能和声子谱计算结果表明二维 BX(X=S, Se, Te) 在热力学和动力学上均是稳定的. 能带结构和电子态密度的计算分析发现三种二维材料均呈现间接带隙半导体行为, 带隙分别为 3.98 eV(BS)、3.84 eV(BSe) 和 2.31 eV(BTe). 采用“应力应变”方法, 计算得到二维 BX(X=S, Se, Te) 的弹性常数、杨氏模量、泊松比以及杨氏模量和泊松比随方向变化的关系并进行了详细的讨论, 发现杨氏模量和泊松比呈现各向同性. 除此之外, 我们还研究了二维 BX(X=S, Se, Te) 的应力-应变关系, 发现 BTe 较 BS 和 BSe 有较强的抗拉伸性. 由于 BS 和 BSe 在价带顶有效质量较大, 为此, 我们采用形变势理论研究了 BTe 的载流子迁移率. 结果发现 BTe 在 a_{01} 和 a_{02} 方向上的电子迁移率分别为 20.8 和 122.6 $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$, 而空穴在两个方向上的迁移率分别为 673.4 和 65.0 $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$, 空穴在 a_{01} 方向上的较高的迁移率说明二维 BTe 具有较好的输运性质.

关键词: 结构预测, 电子结构, 力学性质, 载流子迁移率

PACS: 71.15.Mb, 81.40.Jj, 73.50.Dn

DOI: 10.13380/j.ltpl.2019.03.009

Structural Searching and Properties for Two Dimensional BX(X=S, Se, and Te) from First-principles Calculations

PU Chunying^{1†}, ZHOU Dawei¹, LV Linxia¹, WANG Zhuo², TANG Xin³

1. College of Physics and Electronic Engineering, Nanyang Normal University, Nanyang 473061, China;

2. College of Mechanical and Electronic Engineering, Nanyang Normal University, Nanyang 473061, China;

3. College of Material Science and Engineering, Guilin University of Technology, Guilin 541004, China

Received date: 2019-02-15; accepted date: 2019-04-18

【Abstract】 By means of the particle swarm optimization algorithm and density functional theory on two dimensional (2D) BX (X=S, Se, and Te) structure prediction, we predicted that the lowest-energy structures of 2D BX exhibit bilayer buckled stacking systems and the strong B-B bond is vital to structural stability. To clarify the stability of 2D BX bilayer, we estimated their cohesive energies and phonon dispersion. Compared the cohesive energies with that of silicene and germanene, the higher cohesive energies in three compounds and real frequencies in

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 51501093)、NSFC-河南人才培养联合基金 (批准号: U1304612, U1404608) 和河南省高等学校重点科研项目 (批准号: 20B140010) 资助的课题.

[†] puchunying@126.com

the whole Brillouin zone of 2D BX implied that 2D BX are strongly bonded network with high stability. A hybrid functional of Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06) calculations to calculate the band structures of 2D BX structures indicate that the three compounds are semiconductors with indirect band gap energies of 3.98 eV(BS), 3.84 eV (BSe), and 2.31 eV(BTe). The calculations of elastic constants, Young's modulus, shear modulus, Poisson ratio, together with the direction dependence of Young's modulus and Poisson ratio in-plane indicate that the Young's modulus and Poisson ratio exhibit isotropic. To estimate the elastic limit of 2D BX, we calculated the surface tension of 2D BX and graphene to be compared as a functional of tensile strain. The predicted elastic strain limit suggest that 2D BX bilayers are highly flexible and may have potential applications in flexible display. Furthermore, based on the deformation potential theory, the 2D BTe have electron mobilities (20.8 along a_{01} direction and 122.6 $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ along a_{02} direction, respectively) and hole mobilities (673.4 along a_{01} direction and 65.0 $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ along a_{02} direction, respectively) shown anisotropic in-plane. The higher hole mobility along a_{01} direction indicates that BTe have good transport property.

Keywords: Structure searching, Electronic structure, Mechanical properties, Carrier mobility

PACS: 71.15.Mb, 81.40.Jj, 73.50.Dn

DOI: 10.13380/j.ltpl.2019.03.009

Reference method: PU Chunying, ZHOU Dawei, LV Linxia, WANG Zhuo, TANG Xin, Low. Temp. Phys. Lett. **41**,0204 (2019)

1 引言

自石墨烯被制备以来,二维原子厚度的材料因其优异的物理化学性质而在纳米材料中受到广泛关注^[1-2]. 由于石墨烯是半金属,带隙为零,导带和价带相交于布里渊区,能带很难打开,阻碍了在半导体领域的应用. 因此,具有带隙的新型二维半导体材料是研究者重点关注的问题. 作为同主族的硅烯,锗烯和锡烯也已经通过分子束外延和机械剥离的方法在实验上制备^[3-7],通过理论计算方法,如果考虑自旋轨道劈裂作用,仅仅在硅烯,锗烯和锡烯中得到了meV数量级的带隙^[8-9],而且这些二维材料容易被氧化,在空气中不能稳定存在,较难应用于器件. 与四族二维单质不同的是,五族单质元素形成的单层因较高的载流子迁移率而成为半导体的重要候选材料. 其中磷烯已经从体相黑磷中成功剥离^[10-12],较高的载流子浓度和带隙可调性等特点使磷烯在光电领域有着潜在的应用^[13],但是磷烯同样在空气中容易被氧化而呈现出化学不稳定性. 发现新型具有优越物理性质的高稳定性的半导体材料成为研究者重点关注的问题.

B和N作为C的两个最近邻元素,在单质或者化合物中寻找类石墨烯的二维材料,同样是一条便捷可靠的途径,B和N同样能够形成蜂窝状结构的六角BN二维材料^[14]. 但是六角氮化硼的带隙达到了~6.0 eV,为透明绝缘材料,被称为白石墨烯. B作为第5号元素,存在类似碳的 sp^2 杂化轨道,具有短的共价键半径和多样化的价态,这些性质有利于形成低维的硼同素异形体. 2016年中科院物理研究所吴克辉课题组^[15]采用分子束外延的方法首次成功合成了二维B单质,但是B本征是金属. 为此,研究者开展了基于III族元素同非金属元素形成的二维半导体化合物的研究. 目前,GaS^[16],GaSe^[17-18],GaTe^[19-20],和InSe^[21]相继在实验上被合成出来,并呈现出双层AB'堆垛结构,该结构的半导体在紫外波段有较强的吸收而在光电探测器方面有重要的应用. 基于GaS结构模型,Demirci等人^[22]系统研究了16种III-VI族二维材料及其性质. B作为Ga的同族元素,二维BX(X=S, Se, Te)的最低能量几何结构是否同实验上获得的GaS结构相同? 我们在本文的研究中重点利用结构搜索程序CALYSPO采用全局搜索和优化的方法预测二维BX(X=S,

Se, Te)结构,并且对其热力学稳定性、动力学稳定性、电子结构、力学性质,应力-应变关系、载流子的迁移率等性质做了详细的研究和探索.

2 计算方法

二维BX(S, Se, Te)的结构预测采用的是基于粒子群算法的CALYSPO^[23-24]软件包对其随机产生结构进行能量优化计算. 其中结构搜索采用1~4倍分子式,每个分子式设置了30代,每代产生30个结构,结构演化过程中,每代的能量由低到高的前60%被衍化到下一代中,而下一代的40%的结构是随机产生. 结构优化采用的是基于密度泛函理论的VASP软件包^[25],电子和电子之间的交换关联势采用广义梯度近似(GGA)的投影缀加波泛函(PBE)进行处理^[26-27]. 计算过程中B的 $2s^2 2p^1$ 和X(S, Se, Te)的 $s^2 p^4$ 电子均被看做价电子处理,价电子和芯电子之间的相互作用采用投影缀加波(PAW)势描述^[28]. 为了降低层与层之间的相互作用,真空层设置20 Å. 截断能为500 eV, K点在倒空间的密度为 $2\pi \times 0.03/\text{\AA}$. 作用在系统上的能量为 10^{-5} eV、原子上的力为 10^{-3} eV时结构优化结束. 经过对截断能和K点的测试,发现进一步增加平面波的截断能和K点数目对最后的计算结果的影响可以被忽略. 声子谱的计算采用的是基于有限位移法的PHONOPY程序^[29].

3 计算结果与分析

3.1 二维BX(X=S, Se, Te)结构

图1a和1b分别是预测得到能量最低的二维BX结构的俯视图和侧面图,二维BX是由B和X原子形成的双层褶皱的六角结构密堆积而成. 我们预测得到的BS结构与Lu等人^[30]预测的能量最低结构一致. 表1给出了BX的结构参数、褶皱高度和键长. 由于Te原子半径较大,因此,B-Te(2.315 Å)之间的键长较B-S(1.954 Å)和B-Se(2.106 Å)长,而两层之间的B-B键长在BTe中最短,说明B-B之间键的结合能力较强,引起层的褶皱比较大. 为了进一步分析二维BX(X=S, Se, Te)的化学键,我们计算了BX的差分电荷密度. 差分电荷密度定义为 $\Delta\rho = \rho_{sc} - \rho_{atom}$,其中 ρ_{sc} 是经过自洽计算得到的总的电荷密度, ρ_{atom} 是原子态的电荷密度. 图2给出了二维BX的差分电荷密度图. 从图2中不难看出B-B

和 B-X(X=S, Se, Te) 之间具有明显的共价键. 对其布局数进行计算得到 (CASTEP^[31] 计算) BS、BSe、BTe 化合物中 B-B 之间的布局数分别为 0.77 e 、0.75 e 、0.86 e , B-X 之间布局数为 0.59 e 、0.57 e 、0.56 e , 该结果说明 B-B 之间的共价键较 B-X 之间的强.

表 1 二维 BX 的结构参数 a ; 褶皱高度 Δ ; 键长 d_1 (B-X) 和 d_2 (B-B); 凝聚能 E_c

systems	$a(\text{\AA})$	$\Delta(\text{\AA})$	$d_1(\text{\AA})$	$d_2(\text{\AA})$	$E_c(\text{eV})$
BS	3.056	0.839	1.954	1.704	5.49
BSe	3.273	0.930	2.106	1.686	4.99
BTe	3.588	1.034	2.315	1.680	4.48

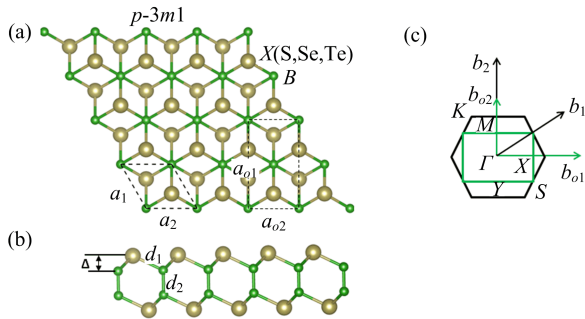


图 1 (a) 二维 BX 结构俯视图 (b) 二维 BX 结构侧面图 (c) 二维 BX 结构原胞和晶胞的布里渊区路径

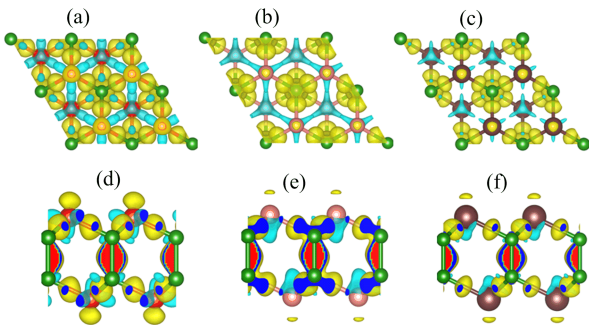


图 2 差分电荷密度的俯视图 (a) BS, (b) BSe, (c) BTe; 侧面图 (d) BS, (e) BSe, (f) BTe. 等能面值: $0.01 \text{ e}\text{\AA}^{-3}$; 金色: $\Delta\rho > 0$; 青色: $\Delta\rho < 0$

3.2 二维 BX 结构稳定性研究

我们通过计算 BX 的凝聚能来研究其结构热力学稳定性, 凝聚能定义^[32]为 $E_{\text{coh}} = (nE_{\text{B}} + nE_{\text{X}} - nE_{\text{BX}})/2n$, E_{B} 、 E_{X} 和 E_{BX} 分别为单个 B 原子、X(X=S, Se, Te) 原子, BX 分子式的能量. 表 1 给出了

BX 的凝聚能, 其中 BS 凝聚能为 5.49 eV/原子, 高于 B₂S 的凝聚能 (5.3 eV/原子)^[33] 和 GaS 结构的凝聚能, 说明 BS 是热力学稳定的. 除此之外, BSe (4.99 eV/原子) 和 BTe (4.48 eV/原子) 的凝聚能高于实验上合成的硅烯 (3.98 eV/原子) 和锗烯 (3.26 eV/atom)^[34] 中单原子凝聚能的理论计算值, 因此, BSe 和 BTe 在能量上均是热力学稳定的.

通过计算 2D-BX(X=S, Se, Te) 的声子谱和声子态密度来分析其动力学稳定性, 如图 3 所示. 在整个布里渊区, 声子的振动频率是正值, 2D-BX(X=S, Se, Te) 在动力学上是稳定的. 由于 B 原子质量小于 X(X=S, Se, Te) 原子的质量, 所以 B 原子的振动频率高于 X(X=S, Se, Te) 原子的振动频率.

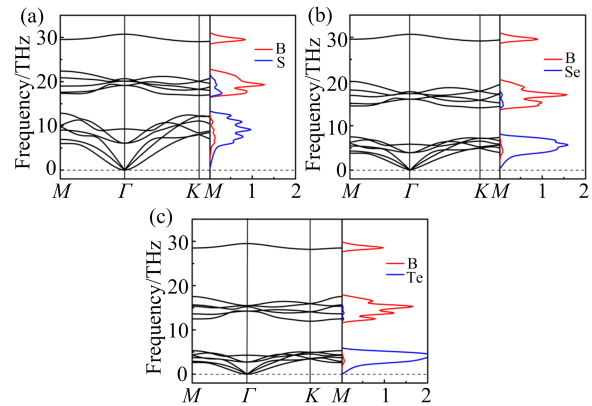


图 3 2D-BX(X=S, Se, Te) 的声子谱和声子态密度

3.3 二维 BX(X=S, Se, Te) 电子结构研究

2D-BX(X=S, Se, Te) 的能带结构和态密度如图 4 所示. 从能带结构图不难分析 BX 均为间接带隙半导体, 利用 PBE 泛函计算得到 BS、BSe 和 BTe 的带隙分别为 2.96、2.91、1.83 eV. 由于 GGA 低估带隙, 我们对能带采用了混合密度泛函 (HSE)^[35] 计算得到 BS、BSe 和 BTe 的带隙分别为 3.98、3.84 和 2.31 eV. 电子态密度的研究结果表明价带顶主要是由 B 的 2p 轨道和 X 原子的 2p 轨道占据, 而导带底是由 B 和 X 原子的 s 轨道及其 p 轨道杂化而成. 图 5 给出了 BX 的价带顶和导带底的电荷密度, 发现价带顶主要是由 B-X 之间的 sigma 键和微弱的孤立的 X 原子的 p_z 轨道构成, 导带底是 B-X 之间的反键构成.

3.4 二维 BX(X=S, Se, Te) 弹性力学性质研究

二维六角晶格有四个非零独立的弹性常数分别为 C_{11} , C_{22} , C_{12} , C_{66} . 由于对称性的限制, 六角结

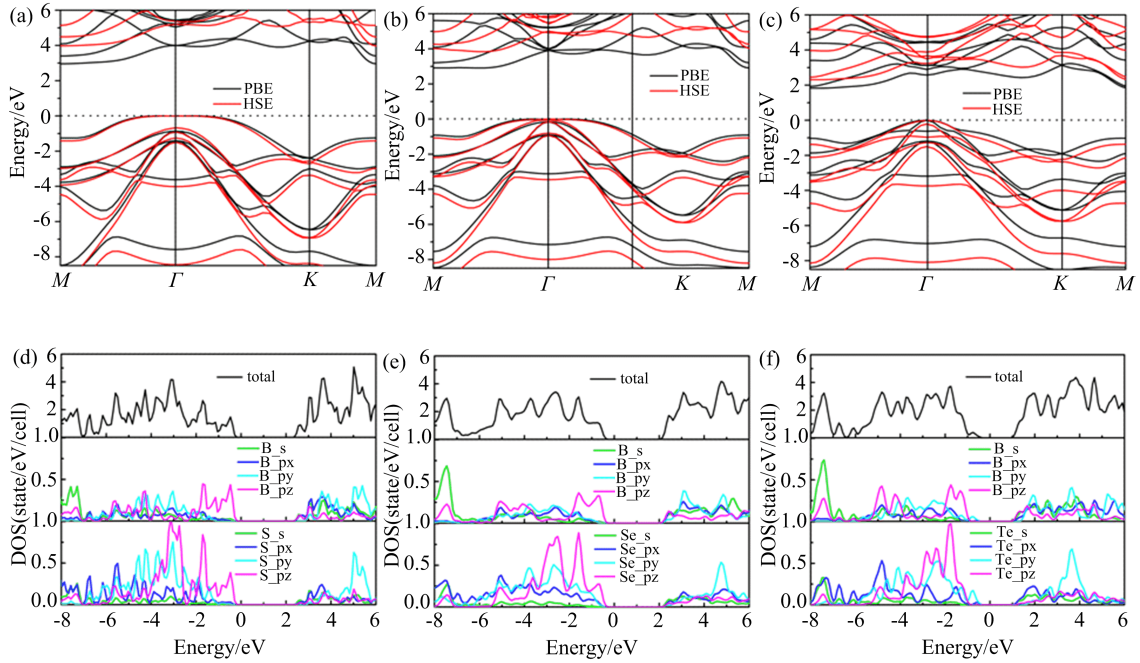
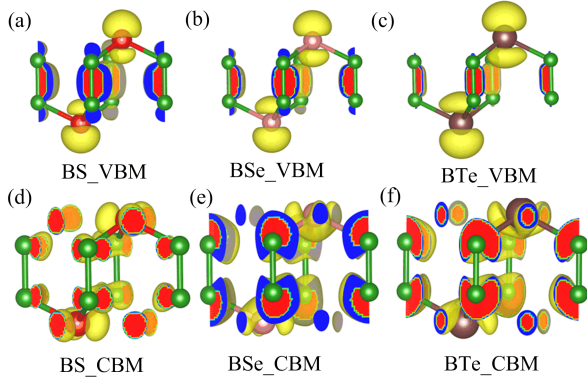


图 4 能带结构 (a)BS, (b)BSe, (c)BTe;总态密度和分态密度 (d) BS, (e)BSe, (f)BTe


 图 5 BX(X=S,Se,Te)价带顶 VBM (a~c)和导带底 CBM (d~f) 的电荷密度,等面值 $0.08 \text{ e}/\text{\AA}^3$

构中 $C_{11} = C_{22}$, 并且 $C_{66} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$. 根据这些弹性常数, 2D 杨氏模量在笛卡尔坐标中沿着 $[10]$ 和 $[01]$ 方向为

$$Y_{[10]}^{2D} = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{22}} \text{ 和 } Y_{[01]}^{2D} = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}},$$

泊松比为

$$\nu_{[10]}^{2D} = \frac{C_{12}}{C_{22}} \text{ 和 } \nu_{[01]}^{2D} = \frac{C_{12}}{C_{11}},$$

2D 剪切模量为

$$G^{2D} = C_{66}.$$

我们用 VASPKIT 程序^[36] 计算得到 BX 弹性

常数 C_{ij} 如表 2 所示, 所有二维 BX 结构的弹性常数均满足弹性力学稳定性条件^[37]: $C_{11}C_{22} - C_{12}^2 > 0$ 和 $C_{11}, C_{22}, C_{66} > 0$.

表 2 二维 BX 沿着 a_1 和 a_2 方向弹性常数 C_{ij} (GPa) ($C_{11} = C_{22}$), 剪切模量 G^{2D} (GPa), 杨氏模量 Y (GPa), 泊松比 ν

化合物	C_{11}	C_{12}	$C_{66} = G^{2D}$	$Y_{[10]}$	$Y_{[01]}$	$\nu_{[10]}$	$\nu_{[01]}$
BS	204.5	25.5	89.5	201.4	201.4	0.124	0.124
BSe	159.4	23.3	68.1	156.0	156.0	0.146	0.146
BTe	129.4	20.7	54.4	126.1	126.1	0.160	0.160

杨氏模量和泊松比在任意方向 θ (θ 为与单层正 x 方向之间的夹角) 上的关系式为^[38]:

$$Y(\theta) = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}s^4 + C_{22}c^4 + \left(\frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} - 2C_{12}\right)c^2s^2},$$

$$\nu(\theta) = \frac{C_{12}(c^4 + s^4) - (C_{11} + C_{22} - \frac{C_{11}C_{12} - C_{12}^2}{C_{66}})c^2s^2}{C_{11}s^4 + C_{22}c^4 + \left(\frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} - 2C_{12}\right)c^2s^2}$$

其中 $c = \cos \theta$ 和 $s = \sin \theta$. 对于 BX 化合物, 图 6 给出了 $Y(\theta)$ 和 $\nu(\theta)$ 随着 θ 角度的变化关系. 杨氏模量和泊松比都是一个标准的圆, 说明其杨氏模量和泊松比具有各向同性. 另外, BS 的杨氏模量值达到了 201.4 GPa, 与石墨烯氧化物 (0.2 TPa) 和

BN (0.25 TPa)相当^[39-40]. BSe 和 BTe 的杨氏模量 (156.0 GPa 和 126.1 GPa) 较石墨烯 (1.0 TPa), MoS₂ (0.33 TPa) 和 BN (0.25 TPa) 低^[41-43], 因此, 二维 BSe 和 BTe 是比较容易弯曲的柔性材料.

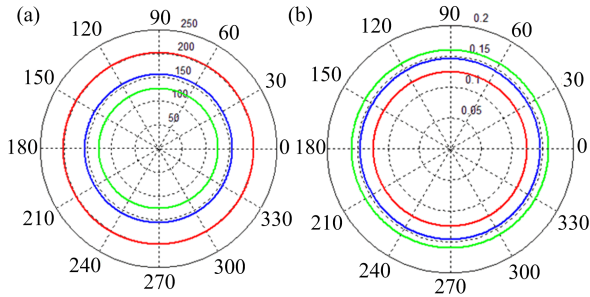


图 6 (a) 杨氏模量 $Y(\theta)$ 和 (b) 泊松比 $\nu(\theta)$ 随角度变化关系. 红色、蓝色和绿色线分别表示 BS、BSe 和 BTe

为了研究 BX 沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向上的应力-应变关系^[44-45], 我们先计算了石墨烯沿着“之”字边和“扶

手”边的应力应变关系, 如图 7a 所示, 石墨烯沿着“扶手”边的最大应力为 109.2 GPa, 对应的应变为 0.196; 沿着“之”字边的最大应力为 121. GPa, 对应的应变为 0.269, 我们的计算结果与其他理论结果一致^[46-47], 说明我们计算方法的准确性. BX 沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向上的应力-应变关系如图 7(b-d) 所示: BS 沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向的最大应力分别为 39.5 和 54.4 GPa, 对应的应变分别为 0.105 和 0.232; BSe(BTe) 沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向的最大应力分别为 30.5 GPa(40.9 GPa) 和 29.6 GPa(23.6 GPa), 对应的应变分别为 0.105(0.232) 和 0.116(0.245). 通过对比不难发现尽管 BS 和 BSe 在断裂时具有相同的应变值, 但是两个方向上的断裂强度 BS 大于 BSe, 而三种材料中 BTe 具有最小的断裂强度, 但是具有较强的抗拉伸性. 对比石墨烯及其 MoS₂ 在应变下的最大应力值^[48-52], 结果表明二维 BX 是易于制作柔性显示器的良好材料.

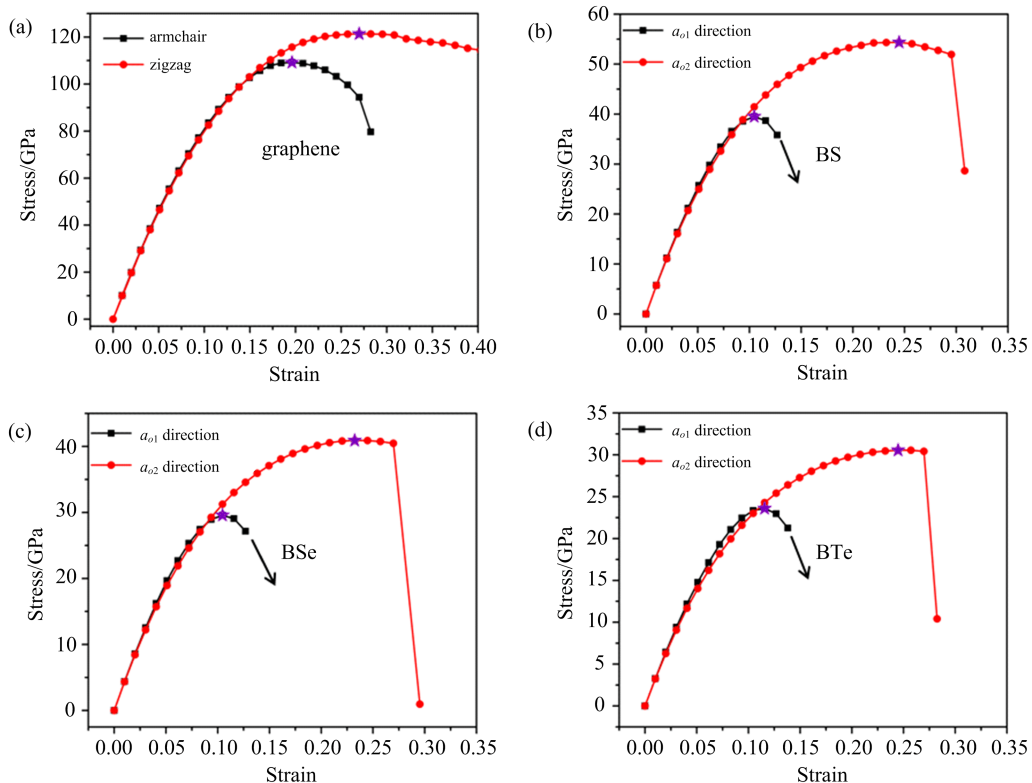


图 7 (a) 石墨烯沿着“之”字边和“扶手”边的应力应变关系, (b) BS 沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向的应力应变关系, (c) BSe 沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向的应力应变关系, (d) BTe 沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向的应力应变关系

3.4 二维 BTe 的载流子迁移率

载流子迁移率是半导体材料性能的一个重要参数, 由于 BS 和 BSe 能带在价带顶的有效质量比较大, 我们研究了二维 BTe 的电子迁移率, 计算之前,

首先要将结构转换为矩形结构, 如图 1(a) 中矩形虚线所示. 该胞的建立主要是为了更加直观的研究载流子分别沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向上的迁移率. 首先要根据该胞的能带色散关系计算电子和空穴沿着 a_{o1} 和

a_{o2} 方向的有效质量,其中有效质量的计算表达式如下:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial E^2 / \partial k^2}$$

计算得到二维 BTe 电子和空穴沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向上有效质量分别为 $2.14m_0$ ($0.23m_0$) 和 $0.41m_0$ ($0.68m_0$),这里的 m_0 是静止电子质量,一般来说有效质量越小,载流子的迁移率就比较高。

在有效质量基础上,根据 Bardeen 和 Shockley^[53] 提出的形变势理论来研究载流子迁移率,对于二维材料,迁移率的公式^[54]如下:

$$\mu_{2D} = \frac{e\hbar^3 C_{2d}}{3k_B T m^* m_d (E_i^i)^2}$$

其中 m^* 是有效质量, m_d 是平均有效质量,根据表达式 $m_d = \sqrt{m_x m_y}$ 得到。 T 是室内温度 300 K。 E_i^i 是电子和空穴沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向上的形变势常数,是通过对比价带顶和导带底的线性拟合得到的系数,其中应力下价带顶和导带底的能量需要减去真

空能级($E_{VBM(CBM)}' = E_{VBM(CBM)} - E_{vacuum}$), C_{2d} 是沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向上的弹性常数,可以根据表达式 $2(E - E_0)/S_0 = C_{2d} \times (\Delta l/l_0)^2$ 进行二次函数拟合得到, E, E_0, S_0 分别是形变下的总能量,晶格平衡条件下的能量以及表面积。

晶格总能量沿 a_{o1} 和 a_{o2} 方向的应变关系如图 8(a)所示,通过二次函数拟合得到两个方向上的弹性常数分别为 129.41 和 129.49 N/m。价带顶、导带底作为应变的函数如图 8(b)所示,通过线性拟合得到形变势的值如表 3 所示。表 3 中给出了计算得到的 E_i^i 、 C_{2d} 、 m^* 、 μ ,从中不难看出二维 BTe 在 a_{o1} 和 a_{o2} 方向上的电子迁移率分别为 20.8 和 $122.6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。而空穴在两个方向上的迁移率为 673.4 和 $65.0 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。通过比较,BTe 沿着 a_{o1} 方向上空穴的迁移率和 a_{o2} 方向上电子的迁移率相对较高,较高的电子迁移率是由于较小的有效质量和较小的形变势共同导致的。

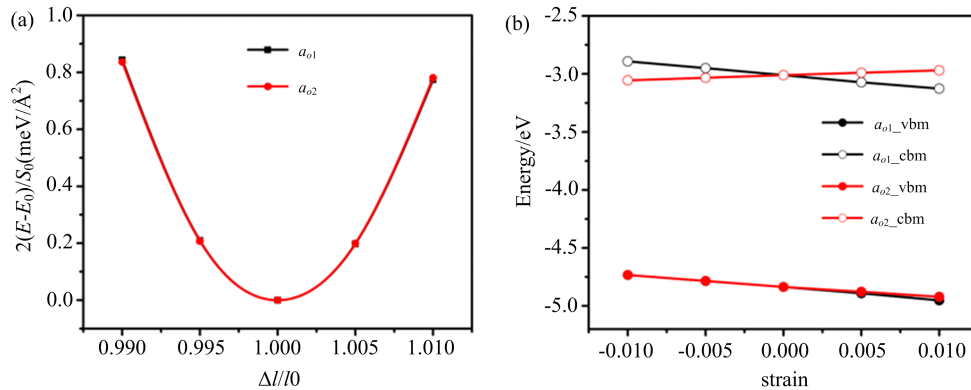


图 8 (a)晶格总能量沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向的应变关系; (b)价带顶和导带底沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向的应变关系

表 3 形变势 (E_i^i), 2D 弹性常数(C_{2d}),有效质量 (m^*), 电子(e)和空穴(h)沿着 a_{o1} 和 a_{o2} 方向的迁移率

方向	载流子	E_i^i (eV)	C_{2d} (N m^{-1})	m^*/m_0	m_d	μ ($\text{cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)
a_{o1}	e	-9.39	129.41	2.14	0.70	20.8
	h	4.34	129.41	0.41	0.53	673.4
a_{o2}	e	-11.82	129.49	0.23	0.70	122.6
	h	-10.85	129.49	0.68	0.53	65.0

4 小结

通过粒子群优化算法和第一性原理计算,发现

二维 BX($X=\text{S, Se, Te}$)的能量最低结构为由 B 和 X 构成的双层六角褶皱结构。对凝聚能、声子谱和弹性常数的计算表明二维 BX 在热力学、动力学和

弹性力学方面均是稳定的. 能带结构和电子结构的计算表明二维 BX 是间接带隙的半导体, 带隙分别为 3.98 eV(BS)、3.84 eV(BSe)和 2.31 eV(BTe). 通过计算弹性常数和杨氏模量、剪切模量、泊松比等力学性质, 发现杨氏模量和泊松比均展现了各向同性特点. 为了进一步研究二维 BX 在应变下的拉伸

断裂强度, 我们计算了 BX 的应力-应变关系, BS 和 BSe 在相同的应变下 BS 有较大的断裂强度值. 另外, 我们最 BTe 的迁移率进行了计算, 二维 BTe 在 a_{01} 和 a_{02} 方向上的电子迁移率分别为 20.8 和 $122.6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. 而空穴在两个方向上的迁移率为 673.4 和 $65.0 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

参 考 文 献

- [1] P. Miro, M. Audiffred, T. Heine, *Chem. Soc. Rev.*, **43** (2014), 6537.
- [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, *Science*, **306**(2004), 666.
- [3] B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. Vizzini, B. Ealet, B. Aufray, *Appl. Phys. Lett.*, **97** (2010), 223109.
- [4] R. Friedlein, Y. Yamada-Takamura, *J. Phys.: Condens. Matter*, **27**(2015), 203201.
- [5] Z. L. Liu, M. X. Wang, J. P. Xu, J. F. Ge, G. L. Lay, P. Vogt, D. Qian, C. L. Gao, C. H. Liu, J. F. Jia, *New J. Phys.*, **16**(2014), 075006.
- [6] E. Bianco, S. Butler, S. S. Jiang, O. D. Restrepo, W. Windl, J. E. Goldberger, *ACS Nano*, **7**(2013), 4414.
- [7] F. F. Zhu, W. J. Chen, Y. Xu, C. L. Gao, D. D. Guan, C. H. Liu, D. Qian, S. C. Zhang, J. F. Jia, *Nature Materials*, **14**(2015), 1020.
- [8] Y. Ma, Y. Dai, M. Guo, C. Niu, B. Huang, *J. Phys. Chem. C*, **116**(2012), 12977.
- [9] C. Liu, H. Jiang, Y. Yao, *Physical Review B*, **84** (2011), 195430.
- [10] L. Li, Y. Yu, G. J. Ye, Q. Ge, X. Ou, H. Wu, D. Feng, X. H. Chen, Y. Zhang, *Nat. Nanotechnol.*, **9**(2014), 372.
- [11] E. S. Reich, *Nature*, **506**(2014), 19.
- [12] W. Lu, H. Nan, J. Hong, Y. Chen, C. Zhu, Z. Liang, X. Ma, Z. Ni, C. Jin, Z. Zhang, *Nano Res.*, **7**(2014), 853.
- [13] Y. Zhang, T. Liu, B. Meng, X. Li, G. Liang, X. Hu, Q. J. Wang, *Nat. Commun.*, **4**(2013), 1811.
- [14] H. Wang, X. Zhang, J. Meng, Z. Yin, X. Liu, Y. Zhao, L. Zhang, *Small*, **11**(2015), 1542.
- [15] B. Feng, J. Zhang, Q. Zhong, W. Li, S. Li, H. Li, P. Cheng, S. Meng, L. Chen, K. Wu, *Nature chemistry*, **8** (2016), 563.
- [16] P. A. Hu, L. Wang, M. Yoon, J. Zhang, W. Feng, X. Wang, K. Xiao, *Nano letters*, **13**(2013), 1649.
- [17] S. Lei, L. Ge, Z. Liu, S. Najmaei, G. Shi, G. You, J. Lou, R. Vajtai, P. M. Ajayan, *Nano letters*, **13**(2013), 2777.
- [18] W. Jie, X. Chen, D. Li, L. Xie, Y. Y. Hui, S. P. Lau, X. Cui, J. Hao, *Angewandte Chemie International Edition*, **54** (2015), 1185.
- [19] Z. Wang, K. Xu, Y. Li, X. Zhan, M. Safdar, Q. Wang, F. Wang, J. He, *ACS nano*, **8**(2014), 4859.
- [20] Z. Wang, M. Safdar, M. Mirza, K. Xu, Q. Wang, Y. Huang, F. Wang, X. Zhan, J. He, *Nanoscale*, **7** (2015), 7252.
- [21] G. W. Mudd, S. A. Svatek, T. Ren, A. Patanè, O. Makarovskiy, L. Eaves, P. H. Beton, Z. D. Kovalyuk, G. V. Lashkarev, Z. R. Kudrynskiy, A. I. Dmitriev, *Advanced Materials*, **25**(2013), 5714.
- [22] S. Demirci, N. Avazlı, E. Durgun, S. Cahangirov, *Physical Review B*, **95**(2017), 115409.
- [23] Y. C. Wang, J. Lü, L. Zhu, Y. M. Ma, *Phys. Rev. B*, **82** (2010), 094116.
- [24] Y. Wang, J. Lü, L. Zhu, Y. Ma, *Comput. Phys. Commun.*, **183**(2012), 2063.
- [25] G. Kresse, J. Furthmüller, *Phys. Rev. B*, **54**(1996), 11169.
- [26] T. Inoshita, S. Jeong, N. Hamada, H. Hosono, *Phys. Rev. X*, **4**(2014), 031023.
- [27] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996), 3865.
- [28] P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B*, **50**(1994), 17953.
- [29] A. Togo, F. Oba, I. Tanaka, *Phys. Rev. B*, **78** (2008), 134106.
- [30] D. Fan, C. Yang, S. Lu, X. Hu, *arXiv preprint arXiv:1803.0345* (2018), 0345.
- [31] S. J. Clark, M. D. Segall, C. J. Pickard, P. J. Hasnip, M. J. Probert, K. Refson, M. C. Payne, *Z. Kristall*, **220** (2005), 567.
- [32] S. Zhang, Z. Yan, Y. Li, Z. Chen, H. Zeng, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**(2015), 3112.
- [33] Y. Zhao, X. Li, J. Liu, C. Zhang, Q. Wang, *Phys. Chem. Lett.*, **9**(2018) 1815.
- [34] L. M. Yang, V. Baidya, I. A. Popov, A. I. Boldyrev, T. Heine, T. Frauenheim, E. Ganz, *J. Am. Chem. Soc.*, **137** (2015), 2757.

- [35] J. Heyd, G. E. Scuseria, E.M. J. Ernzerhof, *Chem. Phys.*, **118**(2003), 8207.
- [36] V. Wang, "Vasppkit, a post-processing program for the vasp code," 2013.
- [37] F. Mouhat, F. Coudert, *Phys. Rev. B*, **90** (2014), 224104.
- [38] L. Wang, A. Kutana, X. Zou, B. I. Yakobson, *Nanoscale*, **7**(2015), 9746.
- [39] C. Gómez-Navarro, M. Burghard, K. Kern, *Nano Lett.*, **8** (2008), 2045.
- [40] J. W. Suk, R. D. Piner, J. An, R. S. Ruoff, *ACS nano*, **4** (2010), 6557.
- [41] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, *Science*, **321** (2008), 385.
- [42] A. Castellanos-Gomez, M. Poot, G. A. Steele, H. S. J. van der Zant, N. Agraït, G. Rubio - Bollinger, *Adv. Mater.*, **24**(2012), 772.
- [43] Q. Wei, X. Peng, *Appl. Phys. Lett.*, **104**(2014), 251915.
- [44] David Roundy, L. Cohen Marvin, *Physical Review B*, **64** (2001), 212103.
- [45] W. Luo, D. Roundy, L. Cohen Marvin, J. W. Morris, *Physical Review B*, **66**(2002), 094110.
- [46] F. Liu, P. Ming, J. Li, *Physical Review B*, **76** (2007), 064120.
- [47] S. Ogata, Y. Shibutani, *Phys. Rev. B*, **68**(2003), 165409.
- [48] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, *Science*, **321** (2008), 385.
- [49] K. S. Kim, Y. Zhao, H. Jang, S. Y. Lee, J. M. Kim, K. S. Kim, J. Ahn, P. Kim, J. Choi, B. H. Hong, *Nature*, **457**(2009), 706.
- [50] S. Bertolazzi, J. Brivio, A. Kis, *ACS Nano*, **5** (2011), 9703.
- [51] A. Castellanos-Gomez, M. Poot, G. A. Steele, H. S. J. van der Zant, N. Agraït, G. Rubio - Bollinger, *Nanoscale Res. Lett.*, **7** (2012), 233.
- [52] X. Peng, Q. Wei, A. Copple, *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.*, **90** (2014), 085402.
- [53] J. Bardeen, W. Shockley, *Phys. Rev.*, **80**(1950), 72.
- [54] J. Xi, M. Long, L. Tang, D. Wang, Z. Shuai, *Nanoscale*, **4** (2012), 4348.