

文章编号: 1000-7032(2023)08-1496-09

新型二维 SiO₂ 结构及面内应变 对其光电性质影响的第一性原理研究

刘雪婷^{1,2}, 刘禹成¹, 赵子昂¹, 王丹丹^{1,2*}, 张 勇^{1,2*}, 冯 明^{1,2*}

(1. 吉林师范大学 物理学院, 吉林 四平 136000;

2. 吉林师范大学 功能材料物理与化学教育部重点实验室, 吉林 长春 130022)

摘要: SiO₂ 通常以三维晶体或无定形结构存在, 限制了其在新技术如新一代集成电路中的应用, 因此二维 SiO₂ 的研究引起了越来越多的关注。本文通过删除三维层状 CaAl₂Si₂O₈ 结构中的 Ca 和 Al 原子, 直接构建出新的二维 SiO₂ 构型。采用基于密度泛函理论的第一性原理计算, 结构优化获得的新型 2D SiO₂ 具有 *P-62m* 对称性, 群号 189。通过结合能、弹性系数、分子动力学模拟和声子谱计算, 发现新型 2D SiO₂ 具有高机械稳定性、热力学稳定性和动力学稳定性。电子性质和光学性质计算发现, 2D SiO₂ 是带隙为 6.08 eV 绝缘体, 且具有良好的光透射率和光导率。此外, 通过研究面内双轴应变对 2D SiO₂ 电子和光学性质的影响, 发现 2D SiO₂ 的带隙和介电函数受面内拉伸应变的影响较压缩应变略大, 不过其整体光学性质受应变影响不大, 保证了其在实际应用中电子性质和光学性质的稳定性。

关键词: 二维 SiO₂; 电子性质; 光学性质; 第一性原理计算

中图分类号: O482.31

文献标识码: A

DOI: 10.37188/CJL.20230072

A Novel Two-dimensional SiO₂ Structure and Influence of In-plane Strain on Its Photoelectric Properties: First-principles Study

LIU Xueting^{1,2}, LIU Yucheng¹, ZHAO Ziang¹, WANG Dandan^{1,2*}, ZHANG Yong^{1,2*}, FENG Ming^{1,2*}

(1. College of Physics, Jilin Normal University, Siping 136000, China;

2. Key Laboratory of Functional Materials Physics and Chemistry of Ministry of Education, Jilin Normal University, Changchun 130022, China)

* Corresponding Authors, E-mail: mila880227@126.com; zhangyong@jlnu.edu.cn; mingfeng@jlnu.edu.cn

Abstract: SiO₂ usually exists in three-dimensional crystal or amorphous structure, which limits its application in new technologies such as new integrated circuits, so the research on two-dimensional SiO₂ has attracted more and more attention. In this paper, a new two-dimensional SiO₂ configuration is constructed directly by removing Ca and Al atoms from the three-dimensional layered CaAl₂Si₂O₈ structure. Using the first principles calculation based on density functional theory, the structure optimization results in the new 2D SiO₂ with *P-62m* symmetry and group number 189. Through calculating binding energy, elastic coefficient, molecular dynamics simulation and phonon spectrum, it is found that the new 2D SiO₂ has high mechanical, thermodynamic and dynamic stability. Further calculations of electronic and optical properties show that 2D SiO₂ is an insulator with band gap of 6.08 eV, and has good optical transmittance and optical conductivity. In addition, by studying the effect of in-plane biaxial strain on the electronic and optical properties of 2D SiO₂, it is shown that the band gap and dielectric function of 2D SiO₂ are slightly more affected by the in-plane tensile strain than by the compression strain, but the strain impact on the overall optical properties of 2D SiO₂ is modest, which ensures the stability of the electronic and optical properties in practical applications.

Key words: two-dimensional SiO₂; electronic properties; optical properties; first-principles calculations

收稿日期: 2023-03-24; 修订日期: 2023-04-11

基金项目: 吉林省自然科学基金(YDZJ202201ZYTS307, 20210101409JC)

Supported by Natural Science Foundation of Jilin Province Program(YDZJ202201ZYTS307, 20210101409JC)

1 引言

二氧化硅(SiO₂)由于热稳定性和化学稳定性高、介电性能和绝缘性能优异、耐腐蚀性好、易制备等优点,在许多现代技术和应用中发挥着关键作用,比如作为集成电路中的绝缘层、金属或金属氧化物纳米颗粒催化剂的载体、玻璃的主要组分、防腐蚀保护膜等^[1-4]。一般地, SiO₂以三维晶体结构或无定形结构存在,尤其是其复杂的三维网格无定形结构,不利于通过表面分析技术进一步研究其表界面结构和性能的关系^[5-6]。另外,随着技术的快速发展,比如新一代的高密度存储器(RAM)以及场效应晶体管(MOSFET)等,都需要大幅减小SiO₂层的厚度、并提高其表面平整度,因此,二维(2D)结构SiO₂的研发引起了研究人员的广泛兴趣^[7-8]。

自2004年Novoselov和Geim等获得单层石墨烯之后,大量的二维材料被成功制备^[9-16]。受此启发,许多SiO₂纳米片已被成功开发^[17-19]。然而,目前主要通过模板法制备的2D SiO₂存在尺寸、形状和厚度不受控制的问题,因此需要对制备SiO₂的前驱体进行研究,为获得可控厚度和尺寸的2D SiO₂提供方向。另一方面,2D SiO₂的原子结构尚不清楚,据报道,2D SiO₂有多种晶型,和三维SiO₂一样它的基本结构单元也是[SiO₄]四面体,中心Si原子被四面体顶角处的4个O原子包围,但是[SiO₄]四面体以何种形式连接组成2D SiO₂结构还需深入研究^[20]。基于上述问题,本文受通过侵蚀MAX相来制备MXene的方法(例如利用HF水溶液侵蚀Ti₃AlC₂,可选择性地清除Al原子,而留下2D Ti₃C₂层)启发^[21-22],从理论层面考虑可以利用类似的方法对层状前驱体CaAl₂Si₂O₈进行化学侵蚀处理,选择性地清除前驱体结构中的Ca和Al原子,最后获得形状和厚度规则的2D SiO₂。

本文采用第一性原理计算方法,对直接通过CaAl₂Si₂O₈获得的2D SiO₂的结构、热力学稳定性和动力学稳定性、电子和光学性质进行研究。并且考虑到在实际应用中,2D SiO₂常与其他材料通过界面物理或化学作用结合,理论上由于材料间的晶格失配,2D SiO₂将受到应变的影响,因此研究应变对2D SiO₂电子及光学性质的影响,对其潜在应用十分必要。本文将进一步研究面内应变对2D SiO₂电子、光学性质的影响。

2 计算方法

第一性原理计算采用材料模拟计算软件VASP,对2D SiO₂的结构、电子和光学性质及其受应变的影响进行模拟。在构建单层2D SiO₂结构时,为消除层间的层间相互作用,在垂直2D SiO₂面方向设置厚度为1.5 nm的真空层。在具体的计算过程中,电子间的交换关联能采用的是广义梯度近似(Generalized gradient approximation, GGA)下的投影缀加波赝势(Perdew-Burke-Ernzerhof, PBE)^[23-25], O原子的2s²2p⁴、Si原子的3s²3p²电子被作为价电子。截断能 E_{cut} 被设置为400 eV,优化2D SiO₂原胞结构时,布里渊区K点网格设置为8×8×1,设置的能量和原子受力收敛精度分别为1×10⁻⁴ eV和0.1 eV/nm。另外,计算电子态密度时需采用更密的K点,因此计算态密度时我们将K-point设置为10×10×1。进行第一性原理分子动力学模拟(AIMD)计算和声子谱计算时,采用(3×3)的2D SiO₂超胞(包含72个O原子和36个Si原子)。一定温度下的AIMD采用NVT系综, AIMD计算的时间设置为10 ps,时间步长为1.0 fs,温度控制采用Nosé-Hoover方法^[26-27]。声子谱计算采用密度泛函微扰理论(DFPT)^[28-29],并结合phonopy程序包进行,能量和原子受力收敛精度分别提高为1×10⁻⁸ eV和0.01 eV/nm。

对2D SiO₂施加面内双轴应变是通过改变面内晶格参数实现的。本征晶格参数为 $a_0 = b_0$,改变后的晶格参数为 $a = b$,那么对2D SiO₂施加的应变 $\delta = (a - a_0)/a_0$, $\delta > 0$ 表示拉伸应变, $\delta < 0$ 表示压缩应变。

3 结果与讨论

3.1 2D SiO₂的结构

本文直接从层状前驱体CaAl₂Si₂O₈的结构(图1(a)、(b))出发,删除结构中的Ca和Al原子,得到2D SiO₂的晶格结构(图1(c)、(d))。结构优化计算发现,2D SiO₂的结构由两个[SiO₄]四面体层以共用O顶端的形式构成(如图1(d)所示),具有P-62m对称性(空间群号189)。2D SiO₂的晶格参数为 $a_0 = b_0 = 0.5119$ nm,沿c方向(图1(d)中的真空层方向)的Si—O键长为0.1625 nm,其他的Si—O键长为0.1623 nm。另外,计算得到的2D SiO₂厚度为0.435 nm,几乎与实验值一致^[19,30]。

为了判断2D SiO₂的机械稳定性,本文计算了

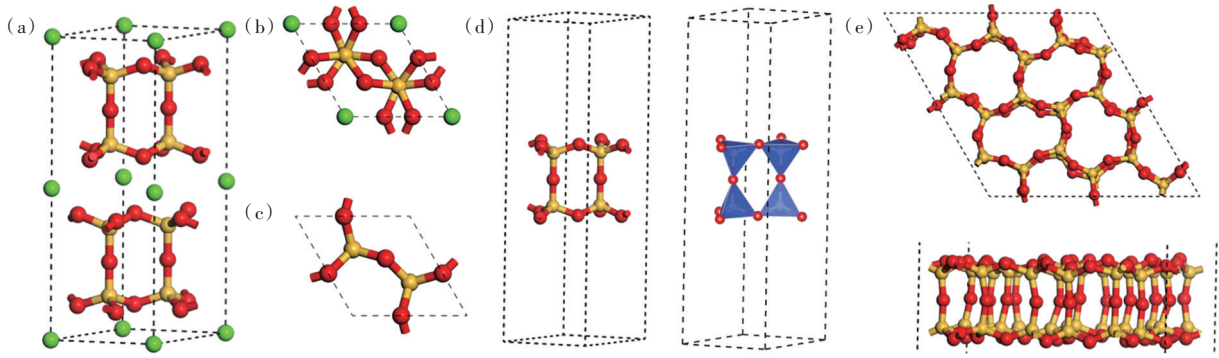


图1 前驱体 $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$ 原胞结构的侧视图(a)和俯视图(b); 2D SiO_2 晶格原胞结构的俯视图(c)和侧视图(d); (e) 在 800 K 温度下 2D SiO_2 的 AIMD 结束时的结构俯视图和侧视图。图中绿色、红色和黄色球分别代表 Ca/Al 原子、O 原子和 Si 原子。

Fig.1 Side view (a) and top view (b) of $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$ unit cell. Top view (c) and side view (d) of 2D SiO_2 unit cell. (e) Top and side views of 2D SiO_2 structure at the end of AIMD calculation under 800 K. The green, red and yellow balls denote Ga/Al, O and Si atoms, respectively.

其弹性模量,若 2D 材料弹性模量的分量同时满足: $C_{11}C_{22} - C_{12}^2 > 0$ 和 $C_{66} > 0$, 则 2D 材料具有良好的机械稳定性。我们计算得到的 2D SiO_2 的弹性模量分量 $C_{11} = C_{22} = 65.5972 \text{ GPa}$, $C_{12} = C_{21} = 15.9083 \text{ GPa}$, $C_{66} = 8.3349 \text{ GPa}$, 满足上述机械稳定性判据,证明 2D SiO_2 具有好的机械稳定性。

为判断 2D SiO_2 的热力学稳定性,我们首先根据材料结合能的定义计算了其结合能: $E_{\text{coh}}(2\text{D SiO}_2) = (mE_{\text{O}} + nE_{\text{Si}} - E_{\text{SiO}_2})/(m+n)$, 其中 E_{O} 、 E_{Si} 和 E_{SiO_2} 分别是每个 O 原子、Si 原子和 2D SiO_2 元胞结构的能量, m 和 n 分别为元胞中 O 原子和 Si 原子的个数。计算得到 2D SiO_2 的结合能为 3.09 eV/aom , 这个值接近于实验上已经获得的锗烯和硅烯的结合能(分别为 3.98 eV/atom 和 3.72 eV/

atom)^[31-32], 这意味着本文预测的 2D SiO_2 很有可能通过实验制备获得。另外,通过 AIMD 分别模拟 2D SiO_2 在 300 K 和 800 K 温度下的结构变化,发现在 300 K 温度下 10 ps 的 AIMD 结束时 2D SiO_2 几乎保持了其初始结构不变,而在 800 K 的 AIMD 结束时其结构发生了轻微扭曲(图 1(e))。这意味着 2D SiO_2 具有良好的热稳定性,其结构转变温度在 800 K 以上。

随后,利用密度泛函微扰理论(DFPT)计算 2D SiO_2 的声子谱来判断其结构动力学稳定性,计算得到的声子谱如图 2(a) 所示。从图中可看出,在整个布里渊区,晶格振动的声子没有虚频(所有的频率都大于 0),这是晶格结构动力学稳定的条件^[33],说明 2D SiO_2 具有好的动力学稳定性。

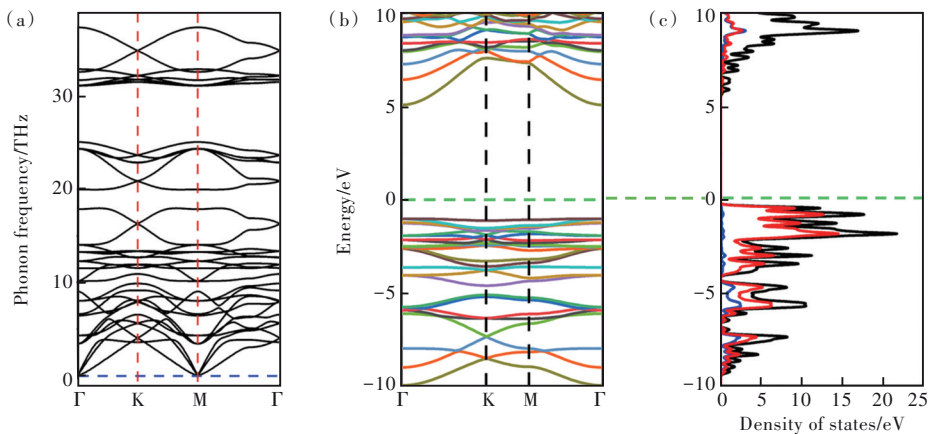


图2 2D SiO_2 的声子谱(a)、电子能带结构(b)和态密度曲线(c)。图(c)中黑色曲线为 TDOS, 红色和蓝色曲线分别为 O 和 Si 原子的 PDOS。

Fig.2 Phonon spectra (a), band structure (b) and density of state plots (c) of 2D SiO_2 . In (c), the black curve denotes the TDOS of 2D SiO_2 , the red and the blue curves respectively represent PDOS of O and Si atoms.

3.2 2D SiO₂ 的电子和光学性质

图 2(b)、(c) 为 2D SiO₂ 的电子能带结构和电子总态密度(TDOS)及分波态密度(PDOS)。图 2(b) 显示 2D SiO₂ 的价带顶和导带底均位于 Γ 点, 且价带顶的能带色散曲线非常平, 对应的 TDOS 在价带顶处出现尖锐的峰; 而导带底的能带色散曲线比较陡峭, 对应的 TDOS 在导带底没有出现尖锐的峰。并且从带边能带色散曲线还可以看出, 2D SiO₂ 的空穴有效质量比电子有效质量更大, 实际上我们结合 VASP 和 vaspkit 计算得到的电子和空穴的有效质量分别为 $0.569m_0$ 和 $3.749m_0$, 这意味着电子迁移率比空穴迁移率大。

经计算得到 2D SiO₂ 的带隙为 6.08 eV, 说明与三维 SiO₂ 一样, 2D SiO₂ 仍然是绝缘体, 结合其形状规则、厚度均匀的二维结构特性, 2D SiO₂ 可作为集成电路中绝缘层的优秀备选材料。

通常用复介电函数 $\varepsilon(\omega)$ 来描述材料的光学特性, $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$, 其中 $\varepsilon_1(\omega)$ 是介电函数的实部(Re), 表示电子跃迁的共振吸收, $\varepsilon_2(\omega)$ 是介电函数的虚部(Im), 表示物质对光的吸收。根据 $\varepsilon(\omega)$, 可以得到材料的光吸收率、反射率、透射率以及光电导率。图 3 给出了 2D SiO₂ 的复介电函数、光吸收率、反射率、透射率和光电导率与光子能量的关系。

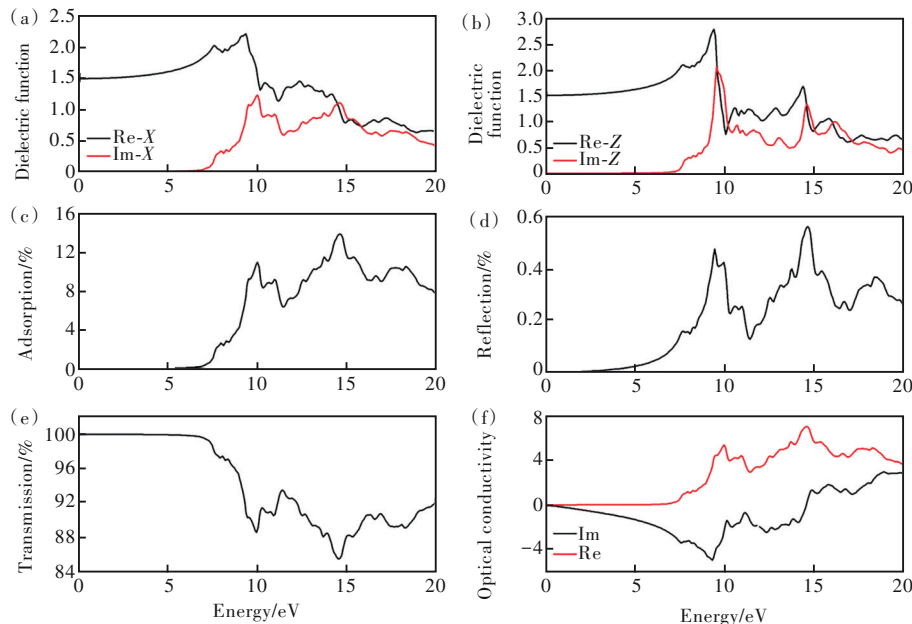


图 3 2D SiO₂ 的 x 和 y 方向复介电函数(a)、 z 方向复介电函数(b)、光吸收率(c)、反射率(d)、透射率(e)、光导率(f)与光子能量的关系。

Fig.3 Dielectric function in x and y direction(a), dielectric function in z direction(b), light absorptivity(c), reflectivity(d), transmissivity(e) and optical conductivity(f) of 2D SiO₂.

从图 3(a)、(b) 中看出, 2D SiO₂ 的复介电函数是各向异性的, z 方向与 x 和 y 方向的复介电函数不同。对于 x 和 y 方向, 介电函数保持一致, 静态介电函数为 $\varepsilon_1(0) = 1.51$, 介电函数实部的整体变化趋势是随着光子能量先几乎保持不变, 然后逐渐增加, 最后逐渐减小。介电函数实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 增加表示介质的极化程度不断增加, $\varepsilon_1(\omega)$ 减小表示对电荷的束缚能力变弱。虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 在 0~6 eV 的光子能量范围内为 0, 表示对该能量范围的光子无吸收, 这与 2D SiO₂ 的带隙大小一致。虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 曲线在 7.92, 9.90, 10.80, 14.59, 17.60 eV 附近出现主要峰值。对于 z 方向, 静态

介电函数 $\varepsilon_1(0) = 1.52$, $\varepsilon_1(\omega)$ 曲线随光子能量的变化关系与 x 和 y 方向类似, 但是在 9.31 eV 处是急剧减小的; 虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 在 0~6 eV 的光子能量范围内也为 0, 在 7.99, 9.53, 11.60, 13.0, 14.70, 16.20 eV 附近出现主要峰值, 并且在 9.53 eV 和 14.70 eV 两处的峰比较尖锐。另外, 将介电函数的虚部与能带结构联系, 我们发现, $\varepsilon_2(\omega)$ 的值开始攀升的起点为其带隙 6.08 eV 对应的光子能量, 并且在 9 eV 左右 $\varepsilon_2(\omega)$ 出现的很强的峰来源于高对称 K 和 M 点处的电子从 VBM 向 CBM 的跃迁。

图 3(c) 给出了 2D SiO₂ 对光的吸收率, 发现

2D SiO₂对6 eV以下的光无吸收,与能带计算结果和介电函数虚部得出的结果一致。2D SiO₂对光的最高吸收率发生在14.52 eV,最高吸收率为13.9%。吸收率随光子能量变化的曲线开始攀升的起点以及峰的位置均与介电函数虚部吻合。图3(d)为2D SiO₂对光的反射率,可以看出2D SiO₂对光的最大反射率仅为0.56%,说明2D SiO₂对光几乎没有反射。图3(e)为2D SiO₂对光的透射率,2D SiO₂对6.0 eV以下光的透射率接近100%,在6~7.5 eV范围内对光的透射率也高达99%,随后对大于7.5 eV的光的透射率急剧下降,在10.0 eV和14.5 eV两个位置出现光透射谷值,最小的光透射率为85.5%。上述结果说明2D SiO₂是一种性能优异的透明材料,可作为二维透明涂层材料。图3(f)为2D SiO₂的光导率,光导率的实部随光子能量变化关系与介电函数的实部和光吸收率相对应,在~7.92, 9.90, 10.90, 14.60, 17.60 eV位置出现几个主要的峰并在14.60 eV处达到最大值;对于光导率的虚部,在光子能量小于14.60 eV范围内光导率虚部小于0,在9.33 eV处最小,然后随着光子能量增加逐渐增加,光导率虚部的负值意味着在相应的能量范围内2D SiO₂的光电导率下降。

3.3 面内应变对2D SiO₂电子和光学性质的影响

本文对2D SiO₂施加的应变范围为-5%~5%,应变梯度为1%。由于同时改变晶格参数 a 和 b ,因此施加的是双轴应变。-5%~0为双轴压缩应变,0~5%为双轴拉伸应变。图4给出了2D SiO₂的带隙(Band gap)、价带顶(VBM)和导带底(CBM)随应变的变化关系,本文中,我们所设置的带边能级位置的参考能级是统一的。从图4(a)看出,在-5%~0的双轴压缩应变下,2D SiO₂的带隙随着应变增加线性增大,在应变为-5%时,带隙增加为6.17 eV。并且CBM和VBM随着压缩应变的增加线性地向高能方向移动,说明双轴压缩应变对CBM和VBM的作用一致。在0~5%的双轴拉伸应变下,2D SiO₂的带隙随着应变增加线性减小,在应变为5%时,带隙减小为5.43 eV。值得注意的是,CBM随着双轴拉伸应变是线性地向低能方向移动;而VBM随着拉伸应变是先向低能方向移动(0~1%),然后线性向高能方向移动(1%~4%),最后向低能方向移动(4%~5%)。CBM和VBM随压缩和拉伸应变不同的变化规律,使2D SiO₂的带隙受拉伸应变的影响更大,这点从图4(a)中也可以看出。

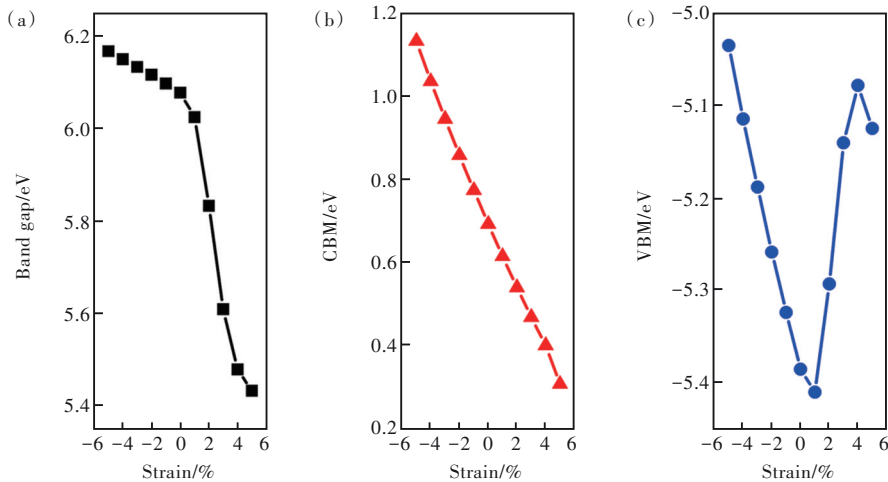


图4 2D SiO₂的带隙(a)、导带底(b)和价带顶(c)随应变的变化关系。

Fig.4 The band gap(a), CBM(b) and VBM(c) values of 2D SiO₂ vs strain.

图5为不同的面内应变作用下2D SiO₂沿不同方向的介电函数实部。 x 方向介电函数实部随应变的变化规律为:在双轴拉伸应变下,静态介电函数 $\epsilon_1(0)$ 逐渐减小,相应的0~7.5 eV能量范围的曲线逐渐向下轻微移动,介电函数实部的前两个主峰位置(~7.5 eV和~9.2 eV处)也略微红移;而在压缩应变下,静态介电

函数 $\epsilon_1(0)$ 逐渐增大,相应的0~7.5 eV能量范围的曲线逐渐向上轻微移动,介电函数实部的前两个主峰位置(~7.5 eV和~9.2 eV处)也略微红移;从主峰位置移动大小可以看出, x 方向介电函数实部受拉伸应变的影响比压缩应变大。对于 z 方向介电函数实部,静态介电函数 $\epsilon_1(0)$ 随应变的变

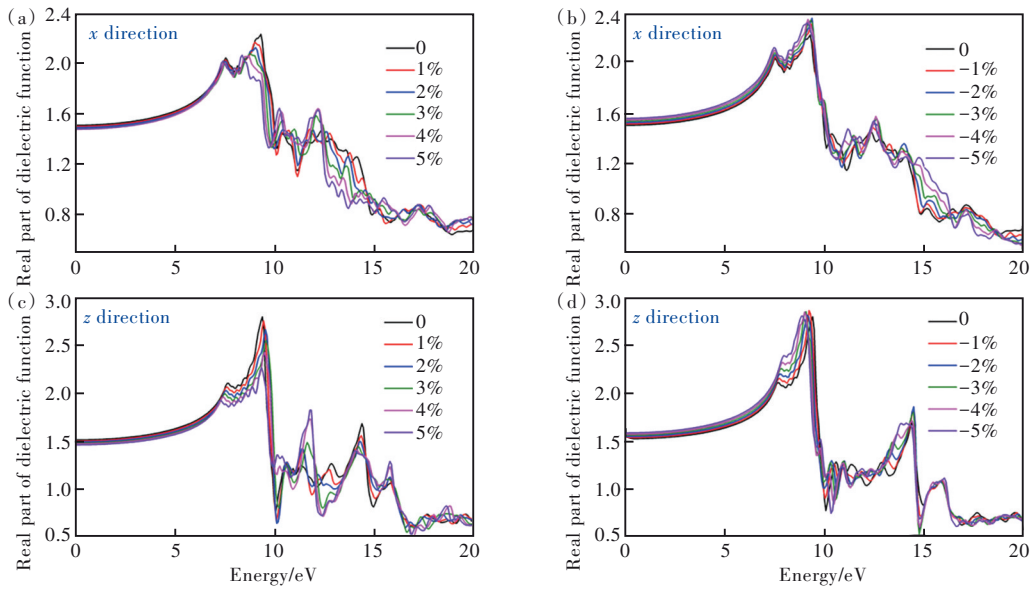


图 5 在不同应变下 2D SiO₂ 的 x 方向介电函数的实部: (a) 拉伸应变, (b) 压缩应变; 在不同应变下 2D SiO₂ 的 z 方向介电函数的实部: (c) 拉伸应变, (d) 压缩应变。

Fig.5 The real part of dielectric function of x direction for 2D SiO₂ under different strains: (a) tensile strain, (b) compressive strain. The real part of dielectric function of z direction for 2D SiO₂ under different strains: (c) tensile strain, (d) compressive strain.

化规律与 x 方向一致。不同的是, 在拉伸应变下, 介电函数实部的第一个主峰位置逐渐红移, 第二个主峰位置在 0~3% 应变范围内逐渐蓝移、在

3% ~ 5% 应变范围内红移; 而在压缩应变下, 介电函数实部的第一个主峰位置逐渐蓝移, 而第二个主峰位置逐渐红移。

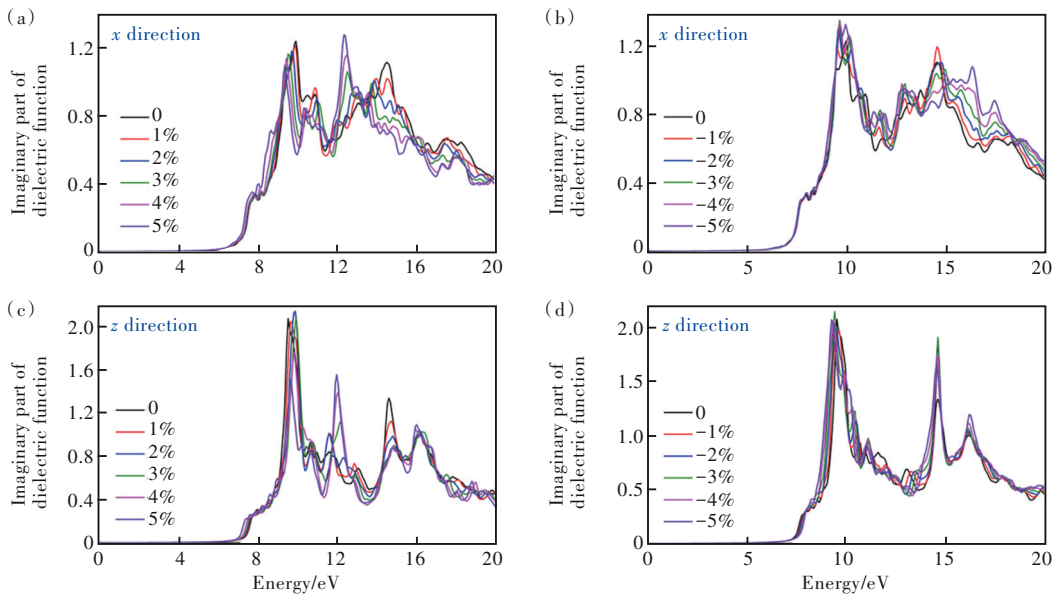


图 6 在不同应变下 2D SiO₂ 的 x 方向介电函数的虚部: (a) 拉伸应变, (b) 压缩应变; 在不同应变下 2D SiO₂ 的 z 方向介电函数的虚部: (c) 拉伸应变, (d) 压缩应变。

Fig.6 The imaginary part of dielectric function of x direction for 2D SiO₂ under different strains: (a) tensile strain, (b) compressive strain. The imaginary part of dielectric function of z direction for 2D SiO₂ under different strains: (c) tensile strain, (d) compressive strain.

图 6 为不同的面内应变作用下 2D SiO₂ 沿不同方向的介电函数虚部。从图中看出, 介电函数虚部受拉伸应变的影响比压缩应变的大, 这与电

子结构(带隙, VBM, CBM)受拉伸应变影响较大的结果一致。 x 方向介电函数虚部随应变的变化为: 在拉伸应变下, 0~10 eV 范围内的虚部峰逐渐

红移,且应变为5%时,在~8.7 eV处出现新的峰,另外应变为3%~5%时在12.37~12.55 eV处出现更强的新峰;在压缩应变下,0~10 eV范围内的虚部峰先红移再蓝移,且应变为-5%时,在10~20 eV范围内出现多个新峰。 z 方向介电函数虚部随应变的变化为:在拉伸应变下,~7.6 eV处的峰逐渐红移,~9.5 eV处的峰在0~3%应变范围内逐渐蓝移、在3%~5%应变下逐渐红移,并且在3%~5%应变下在~12.0 eV处出现新的较强的峰;在压缩应变下,~7.6 eV处的峰逐渐蓝移,~9.5 eV处的峰逐渐红移,且10~20 eV范围内的主峰都有所增强。综合来看,在拉伸应变下,介电函数虚部曲线开始攀升的起点在拉伸应变下逐渐红移,对应的光子能量逐渐减小,说明电子跃迁越来越容易,而曲线开始攀升的起点在压缩应变下变化较小,说

明拉伸应变会使带边电子的跃迁变得容易、拉伸应变对带边电子跃迁影响较小,这与带隙随应变的变化规律一致。

图7为2D SiO₂在不同应变下的吸收率、反射率、透射率和光导率。根据上述介电函数受应变影响分析,在-5%~5%范围内的面内应变对介电函数影响不是特别大,因此为使图片简洁,图7中只给出了2D SiO₂的光学性质在-5%、0和5%应变下的曲线。从图7(a)~(d)可看出,吸收率随应变的变化规律与介电函数虚部的变化规律一致,拉伸应变会略微增强吸收,然而应变对整体光的吸收、反射、透射和光导率影响很小。这说明,在实际应用中2D SiO₂即使在应变作用下,其光学性能依然能保持稳定,不会对器件或设备性质造成不良影响。

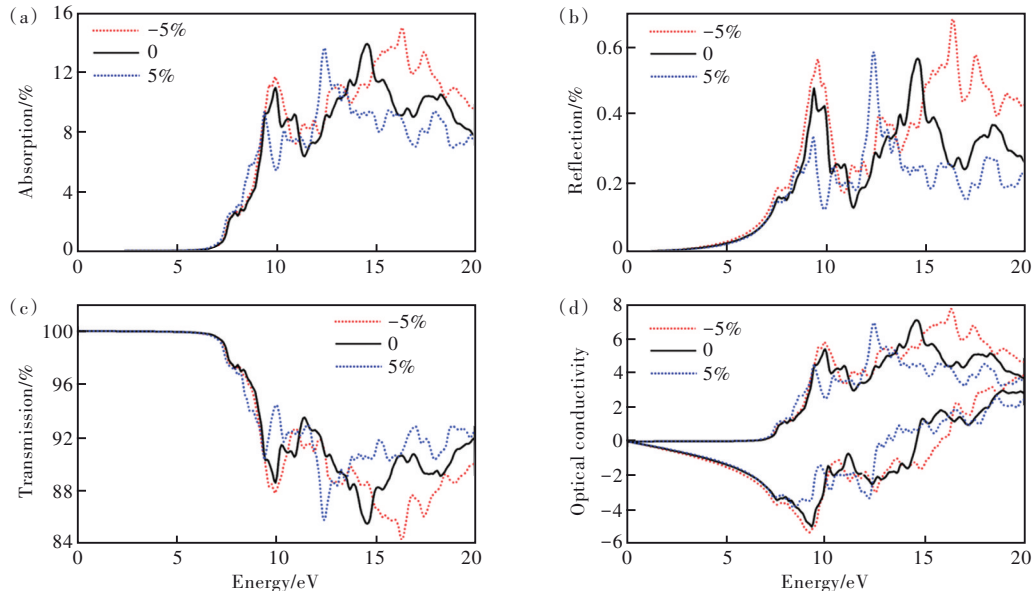


图7 在不同应变下2D SiO₂的吸收率(a)、反射率(b)、透射率(c)和光导率(d)。

Fig.7 The light absorptivity (a), reflectivity (b), transmissivity (c) and optical conductivity (d) of 2D SiO₂ under different strains.

4 结 论

本文从前驱体CaAl₂Si₂O₈出发,直接删除层状前驱体结构中的Ca和Al原子,获得了层状2D SiO₂结构($P-62m$ 对称性,空间群号189)。采用第一性原理计算研究了新型2D SiO₂的结合能、弹性系数、声子谱以及分子动力学模拟,验证了该2D SiO₂结构具有良好的机械稳定性、动力学稳定性和热力学稳定性。通过计算得到了2D SiO₂的电子能带结构、介电函数,以此获得了其光吸收率、反射率、透射率和光导率等光学性质,

发现2D SiO₂是带隙为6.08 eV的优秀绝缘体,并且对0~7.5 eV范围的光透射率可达99%以上,是一种优秀的透明材料,可作为透明涂层或填充材料。另外,计算发现,在-5%~5%应变范围内,2D SiO₂的介电函数会受到影响,但是不会影响其整体光学性质,说明2D SiO₂在应变作用下光学性质非常稳定。

本文专家审稿意见及作者回复内容的下载地址:
<http://cjl.lightpublishing.cn/thesisDetails#10.37188/CJL.20230072>.

参 考 文 献:

- [1] SCHINDLE C, WEIDES M, KOZICKI M N, *et al.* Ultra-low current resistive memory based on Cu-SiO₂ [C]. *Proceedings of 2008 IEEE Silicon Nanoelectronics Workshop, Honolulu*, 2008: 1-2.
- [2] LIU S R, LUO S T, WU X D, *et al.* Application of silica-alumina as hydrothermally stable supports for Pt catalysts for acid-assisted soot oxidation [J]. *Rare Met.*, 2023, 42(5): 1614-1623.
- [3] KIM S G, SHIN H, PARK J S, *et al.* Effect of SiO₂ addition to BaO-ZnO-B₂O₃ glass on dielectric and thermal properties for application to barrier ribs of plasma display panels [J]. *J. Electroceram.*, 2005, 15(2): 129-134.
- [4] HU G J, XIAO Y X, YING J. Nano-SiO₂ and silane coupling agent co-decorated graphene oxides with enhanced anti-corrosion performance of epoxy composite coatings [J]. *Int. J. Mol. Sci.*, 2021, 22(20): 11087-1-12.
- [5] WANG H, CHEN Z W, DENG X Y, *et al.* Template-free synthesis of macroporous SiO₂ catalyst supports for diesel soot combustion [J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2018, 57(34): 11600-11607.
- [6] YU X H, ZHAO Z, WEI Y C, *et al.* Three-dimensionally ordered macroporous SiO₂-supported transition metal oxide catalysts: facile synthesis and high catalytic activity for diesel soot combustion [J]. *RSC Adv.*, 2015, 5(61): 49780-49790.
- [7] SCHROEDER T, ADEL T, RICHTER B, *et al.* Epitaxial growth of SiO₂ on Mo(112) [J]. *Surf. Rev. Lett.*, 2000, 7(1-2): 7-14.
- [8] HEYDE M, SHAIKHUTDINOV S, FREUND H J, *et al.* Two-dimensional silica: crystalline and vitreous [J]. *Chem. Phys. Lett.*, 2012, 550: 1-7.
- [9] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films [J]. *Science*, 2004, 306(5696): 666-669.
- [10] LIU L, PARK J, SIEGEL D A, *et al.* Heteroepitaxial growth of two-dimensional hexagonal boron nitride templated by graphene edges [J]. *Science*, 2014, 343(6167): 163-167.
- [11] ROBERTSON J, LIU X, YUE C L, *et al.* Wafer-scale synthesis of monolayer and few-layer MoS₂ via thermal vapor sulfurization [J]. *2D Mater.*, 2017, 4(4): 045007-1-21.
- [12] LEE K, KIM S W, TODA Y, *et al.* Dicalcium nitride as a two-dimensional electride with an anionic electron layer [J]. *Nature*, 2013, 494(7437): 336-340.
- [13] 江涛, 黄迪, 宋仁康, 等. 二维材料非线性光学显微 [J]. *光学精密工程*, 2022, 30(21): 2711-2736.
JIANG T, HUANG D, SONG R K, *et al.* Nonlinear optical microscopy in two-dimensional materials [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2022, 30(21): 2711-2736. (in Chinese)
- [14] 陈哲学, 王卫彪, 梁程, 等. 二维量子片及其光学研究进展 [J]. *中国光学*, 2021, 14(1): 1-17.
CHEN Z X, WANG W B, LIANG C, *et al.* Progress on two-dimensional quantum sheets and their optics [J]. *Chin. Opt.*, 2021, 14(1): 1-7. (in Chinese)
- [15] 林述锋, 沈田子. 氧化石墨烯液晶的光电特性与显示应用 [J]. *液晶与显示*, 2020, 35(7): 733-740.
LIN S F, SHEN T Z. Electrical-optical properties of graphene oxide liquid crystal and its applications [J]. *Chin. J. Liq. Cryst. Disp.*, 2020, 35(7): 733-740. (in Chinese)
- [16] 夏凤梁, 石凯熙, 赵东旭, 等. 二维WSe₂场效应晶体管光电性能 [J]. *发光学报*, 2021, 42(2): 257-263.
XIA F L, SHI K X, ZHAO D X, *et al.* Optoelectronic performance of 2D WSe₂ field effect transistor [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2021, 42(2): 257-263. (in Chinese)
- [17] TODOROVA T K, SIERKA M, SAUER J, *et al.* Atomic structure of a thin silica film on a Mo(112) substrate: a combined experimental and theoretical study [J]. *Phys. Rev. B*, 2006, 73(16): 165414-1-9.
- [18] SEIFERT J, BLAUTH D, WINTER H. Evidence for 2D-network structure of monolayer silica film on Mo(112) [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 103(1): 017601-1-4.
- [19] LÖFFLER D, UHLRICH J J, BARON M, *et al.* Growth and structure of crystalline silica sheet on Ru(0001) [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 105(14): 146104-1-4.
- [20] GAO Z B, DONG X, LI N B, *et al.* Novel two-dimensional silicon dioxide with in-plane negative poisson's ratio [J]. *Nano Lett.*, 2017, 17(2): 772-777.
- [21] KAJIYAMA S, SZABOVA L, SODEYAMA K. Sodium-ion intercalation mechanism in MXene nanosheets [J]. *ACS*

- Nano*, 2016, 10(3): 3334-3341.
- [22] SUN N, YANG B Y, ZHENG J C, *et al.* Effect of synthesis temperature on the phase structure, morphology and electrochemical performance of Ti_3C_2 as an anode material for Li-ion batteries [J]. *Ceram. Int.*, 2018, 44(14): 16214-16218.
- [23] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, 77(18): 3865-3868.
- [24] KRESSE G, JOUBERT D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method [J]. *Phys. Rev. B*, 1999, 59(3): 1758-1775.
- [25] GRIMME S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction [J]. *J. Comput. Chem.*, 2006, 27(15): 1787-1799.
- [26] PAYNE M C, TETER M P, ALLAN D C, *et al.* Iterative minimization techniques for *ab initio* total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients [J]. *Rev. Mod. Phys.*, 1992, 64(4): 1045-1097.
- [27] MARTYNA G J, KLEIN M L, TUCKERMAN M E. Nosé-Hoover chains: the canonical ensemble *via* continuous dynamics [J]. *J. Chem. Phys.*, 1992, 97(4): 2635-2643.
- [28] BARONI S, GIANNOZZI P, TESTA A. Green's-function approach to linear response in solids [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, 58(18): 1861-1864.
- [29] GONZE X. Perturbation expansion of variational principles at arbitrary order [J]. *Phys. Rev. A*, 1995, 52(2): 1086-1095.
- [30] WEISSENRIEDER J, KAYA S, LU J L, *et al.* Atomic structure of a thin silica film on a Mo(112) substrate: a two-dimensional network of SiO_4 tetrahedra [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95(7): 076103-1-4.
- [31] DAS D K, SARKAR J. Comparison of mechanical properties of silicene estimated using different testing procedures: a molecular dynamics study [J]. *J. Appl. Phys.*, 2018, 123(4): 044304-1-9.
- [32] TIWARI A, BAHADURSHA N, PALEPU J, *et al.* Comparative analysis of boron, nitrogen, and phosphorous doping in monolayer of semi-metallic xenes(graphene, silicene, and germanene): a first principle calculation based approach [J]. *Mat. Sci. Semicon. Proc.*, 2023, 153: 107121-1-5.
- [33] 濮春英, 李春萍, 吕林霞, 等. 二维BCN的新结构及光电性质的第一性原理研究 [J]. *发光学报*, 2020, 41(10): 1294-1301.
- PU C Y, LI C P, LYU L X, *et al.* Structure and optoelectronic properties for two dimensional BCN from first-principles calculations [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2020, 41(10): 1294-1301. (in Chinese)



刘雪婷(1997-),女,吉林白城人,硕士,2023年于吉林师范大学获得硕士学位,主要从事新型二维光电功能材料的结构设计和性能研究。

E-mail: lxt1071327379@163.com



张勇(1982-),男,吉林四平人,博士研究生,教授,2010年于吉林师范大学获得硕士学位,主要从事闪烁玻璃及闪烁光纤面板的研究。

E-mail: zhangyong@jlnu.edu.cn



王丹丹(1987-),女,河南商丘人,博士,副教授,2015年于中国科学院长春光学精密机械与物理研究所获得博士学位,主要从事新型无机功能材料的结构设计和光电性能理论研究。

E-mail: mila880227@126.com



冯明(1981-),男,吉林辽源人,博士,教授,2011年于哈尔滨工业大学获得博士学位,主要从事外物理场耦合光电催化反应设计和高比能二次电池关键材料开发与应用。

E-mail: mingfeng@jlnu.edu.cn