



二维BCN的新结构及光电性质的第一性原理研究

濮春英, 李春萍, 吕林霞, 周大伟, 唐鑫

引用本文:

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 Chun-ying, LI Chun-ping, LYU Lin-xia, et al. Structure and Optoelectronic Properties for Two Dimensional BCN from First-principles Calculations[J]. *Chinese Journal of Luminescence*, 2020, 41(10): 1294–1301.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.37188/CJL.20200179>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Te掺杂单层MoS₂的电子结构与光电性质

Electronic Structure and Photoelectric Properties of Te-doped Single-layer MoS₂

发光学报. 2014(7): 785–790 <https://doi.org/10.3788/fgxb20143507.0785>

Zn_{1-x}Mg_xO电子结构及光学性质的第一性原理GGA+U方法研究

First-principles GGA+U Investigation on The Electronic Structure and Optical Properties of Zn_{1-x}Mg_xO

发光学报. 2018, 39(6): 795–801 <https://doi.org/10.3788/fgxb20183906.0795>

纤锌矿Zn_{1-x}Mg_xO极化特性的第一性原理GGA+U方法研究

Polarization Properties of Wurtzite Structure Zn_{1-x}Mg_xO : A GGA + U Investigation

发光学报. 2015, 36(5): 497–501 <https://doi.org/10.3788/fgxb20153605.0497>

点缺陷对Al_{0.5}Ga_{0.5}N纳米片的电子性质和光学性质影响:第一性原理研究

Effects of Point Defects on Electronic Structure and Optical Properties of Al_{0.5}Ga_{0.5}N Nanosheets: First-principles Investigation

发光学报. 2019, 40(8): 979–986 <https://doi.org/10.3788/fgxb20194008.0979>

硼烯纳米带能带结构和态密度的第一性原理研究

Energy Band Structure and Density of States of Borophene Nanoribbons: The First Principle Calculations

发光学报. 2018, 39(12): 1674–1678 <https://doi.org/10.3788/fgxb20183912.1674>

文章编号: 1000-7032(2020)10-1294-08

二维 BCN 的新结构及光电性质的第一性原理研究

濮春英^{1*}, 李春萍², 吕林霞¹, 周大伟¹, 唐 鑫³

(1. 南阳师范学院 物理与电子工程学院, 河南 南阳 473061;

2. 中国人民解放军空军航空大学 基础部, 吉林 长春 130022; 3. 桂林理工大学 材料科学与工程学院, 广西 桂林 541004)

摘要: 采用粒子群优化算法的结构预测程序 CALYPSO 结合基于密度泛函理论的 VASP 软件包对 $B_6C_6N_6$ 进行结构预测, 得到新的二维 BCN 结构, 该结构由 6 个 B、6 个 C、6 个 N 组成类石墨烯六角结构, 其中 B—N、B—C—N 以及 C—C 之间形成的六环是稳定 BCN 结构的关键。凝聚能和声子谱计算结果表明二维 BCN 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表明 BCN 是禁带宽度为 2.60 eV 直接带隙半导体。基于形变势理论, 计算了 BCN 新结构的载流子迁移率, 发现 BCN 在“之”字边和“扶手”边方向上的电子迁移率分别为 $632.5, 923.3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 而空穴在两个方向上的迁移率分别为 $765.7, 622.6 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 迁移率的值明显高于 MoS_2 的载流子迁移率, 相对较高的迁移率说明二维 BCN 具有较好的输运性质。光学性质的计算研究表明 BCN 的介电函数虚部峰值同吸收谱和光电导率的实部峰值吻合得很好, 可见光范围内的吸收峰位于光子能量 $\sim 2.61 \text{ eV}$ 处, 可见光范围内的吸收主要归因于电子从价带顶到导带底的跃迁。本研究结果为实验上实现原子比为 6:6:6 的 BCN 的制备以及 BCN 在光电器件方面的应用提供了重要的理论依据。

关键词: 结构预测; 二维 BCN; 光电性质; 第一性原理

中图分类号: O469 文献标识码: A DOI: 10.37188/CJL.20200179

Structure and Optoelectronic Properties for Two Dimensional BCN from First-principles Calculations

PU Chun-ying^{1*}, LI Chun-ping², LYU Lin-xia¹, ZHOU Da-wei¹, TANG Xin³

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

2. Fundamental Department, Aviation University of Air Force, Changchun 130022, China;

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

* Corresponding Author, E-mail: puchunying@126.com

Abstract: By means of the particle swarm optimization algorithm and density functional theory on two dimensional $B_6C_6N_6$ structure prediction, we predicted that the lower-energy structure of BCN monolayer composed of C_6 , B_3N_3 , and $B_2C_2N_2$ ring, is vital to structural stability. The calculation of cohesive energy and phonon spectra indicate that the BCN is stable thermally and dynamically, respectively. Our HSE06 calculation shows that BCN is a direct-gap semiconductor with a band-gap of 2.60 eV. Furthermore, based on the deformation potential theory, the BCN monolayer has electron mobility ($632.5 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ along “zigzag” direction and $923.3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ along “armchair” direction, respectively) and hole mobility ($765.7 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ along “zigzag” direction and $622.6 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ along “armchair” direction, respectively), higher than that of

收稿日期: 2020-06-28; 修订日期: 2020-07-17

基金项目: 国家自然科学基金(51501093); 国家自然科学基金河南联合基金(U1904179)资助项目

Supported by National Natural Science Foundation of China(51501093); Henan Joint Funds of The Natural Science Foundation of China(U1904179)

MoS₂. The higher carrier mobility indicates that BCN has good transport property. The calculation of optical properties shows that the peak of dielectric function of BCN is in good agreement with the peak of absorption spectrum and photoconductivity. The absorption peak in the visible light range is located at the photon energy of ~2.61 eV, which mainly originates the electron transition from the valence band maximum to the conduction band minimum. The results of this study provide a theoretical basis for the application of BCN in optoelectronic devices.

Key words: structure searching; two dimensional BCN; electric properties; first-principle

1 引 言

自 2004 年 Novoselov 等成功地将石墨烯剥离出来,二维材料因其优异的电学、光学及力学等性能在纳米材料中受到大量研究者的关注^[1-2]。然而,石墨烯虽然具有良好的力学和导热性能及高达 10⁵ 的电子迁移率,但是带隙为零,导带和价带相交在同一个点,限制了它在半导体器件上的应用。因此,具有带隙的二维半导体材料成为研究者重点关注的问题。一系列具有带隙的二维材料包括过渡族二硫化物^[3]、六角氮化硼^[4]、过渡族碳(氮)化物^[5-6]、磷烯^[7-9]等均在实验上相继被合成出来。作为五族单质元素磷形成的单层磷烯因较高的载流子迁移率和带隙可调控等特点使得磷烯在光电领域具有重要的应用价值^[10],但是结构易氧化的缺点限制了它在半导体领域的应用。而作为过渡族二硫化物的典型代表,MoS₂ 是禁带宽度为 1.8 eV 的直接带隙半导体材料,在已知二维半导体中光电性能最为优越,但是载流子迁移率较低,同样限制了它在电子领域的应用。

C 的两个最近邻元素 B 和 N,形成与石墨烯类似的六角氮化硼(h₂BN)二维材料^[4]。但是六角氮化硼的带隙达到了 ~6.0 eV,为透明绝缘材料。因此,如果在二维蜂窝状结构中同时包含 B、C、N 这 3 种元素,就可以实现性质的互补,既可以弥补石墨烯零带隙的缺陷,又可以通过调节组分比实现不同带隙值的特点,从而应用在各种光电器件中。然而,实验和理论研究^[11-13]均发现,由于 C—C 键和 B—N 键的键能高于 C—N 键和 B—C 键,导致实验中合成的 BCN 结构出现了一些富 C 区域和 BN 区域,致使 B、C、N 分布不均匀,出现局域的石墨烯和 h₂BN 结构,产生相分离现象,限制了带隙的调节。Beniwal 等^[13]在实验上合成了化学计量比并且 B、C、N 均匀分布的类

石墨烯结构 g-BCN,但是 B、C、N 原子排列仍旧未知。理论上,Zhu^[14]、Azevedo^[15]、Raidongia^[16]等分别提出了 BCN- α 、BCN- γ 和 BCN- θ 结构,Zhang 等^[17]采用结构搜索的方法对相同原子比例的 BCN、B₄C₄N₄ 和 B₈C₈N₈ 等进行结构搜索和能量优化,发现了 BCN- β 、BCN- δ 、BCN- ε 和 BCN- η 结构,并对结构进行了详细的光电性质研究,但是对等原子比例的 B₆C₆N₆ 结构尚未研究。

本文利用结构搜索程序 CALYSPO 采用全局搜索和优化的方法对 B₆C₆N₆ 进行结构搜索,发现了一种新的 B、C、N 排列的二维 BCN 结构,并对其结构稳定性、电子结构、载流子迁移率、光学性质等做了详细的研究和讨论。

2 计算方法

二维 BCN 结构预测采用的是吉林大学马琰铭课题组开发的基于粒子群蜂窝算法的 CALYSPO^[18-19]程序,对通过随机变量产生的结构进行能量优化。结构搜索和能量计算均是在 0 GPa 和 0 K 下进行,我们采用了 6 倍 BCN 分子式(B₆C₆N₆)进行结构搜索,共设置了 30 代,每代产生 50 个结构。结构优化和能量计算采用 VASP 程序^[20],电子-电子之间的交换关联能采用的是广义梯度近似(GGA)下的投影缀加波泛函(PBE)^[21]。由于密度泛函对带隙的低估,我们采用混合密度泛函(HSE)方法^[22]进行了修正。在具体计算过程中 B 的 2s²2p¹、C 的 2s²2p² 和 N 的 2s²2p³ 电子作为价电子,芯电子和价电子之间采用布洛赫提出的投影缀加波(PAW)势描述^[23]。由于是二维材料,我们在真空层方向设置 2 nm 用来减小层-层之间的作用。截断能和 K 点网格分别为 520 eV 和 5 × 5 × 1。作用在整个晶体上的能量为 10⁻⁵ eV,原子受到的力在 10⁻³ eV 以内时结构优化结束。截断能和 K 点经过测试后是收敛的。根

据有限位移方法,我们采用 PHONOPY 程序计算了 BCN 的声子谱^[24]。声子谱的计算采用 $3 \times 3 \times 1$ 超胞,能量和原子受力收敛精度分别为 10^{-6} eV 和 10^{-3} eV/atom。一定温度下的热力学稳定性采用 NVT 系综下的从头算分子动力学进行模拟。

3 结果与讨论

3.1 二维 BCN 结构和稳定性

图 1(a) 是搜索得到能量较低的二维 BCN 结构,该结构是由 B—N 环、B—C—N 环和 C 元素构成的六角圆环交替排列而成的六角结构,每个原胞中包含 6 个 B、6 个 C、6 个 N,对应的分子式为 $B_6C_6N_6$,空间群为 $P6/mmm$ (No. 191),晶体参数 $a = b = 0.75352$ nm。从 BCN 的原子空间分布看出:6 个 C 构成的 C 环与 6 个 N 连接形成 C—N 键,而 6 个 N 又与 12 个 B 形成 B—N 键,因此 C 六环嵌在 6 个 N 和 12 个 B 形成的环中间。C—C、C—N、B—N、B—B 之间的键长分别为 0.144 6, 0.144 2, 0.143 2, 0.155 3 nm。二维 BCN 的化学键是决定结构稳定和原子成键的关键因素,通过计算 BCN 的差分电荷密度进一步分析 BCN 成键的特点。

其中电荷密度的差定义为 $\Delta\rho = \rho_{sc} - \rho_{atom}$, 其中 ρ_{sc} 是电子经过自洽后得到的电荷密度, ρ_{atom} 是 B、C、N 原子孤立存在时的电荷密度。图 1(b) 给出了二维 BCN 的差分电荷密度图。从图中不难看出 C—C、C—N、B—N、B—B 之间具有明显的共价键,且 B—B 之间共价性较强, C—N 之间共价性较弱。

我们通过计算 BCN 凝聚能衡量结构的热力学稳定性,凝聚能的计算定义为 $E_{coh} = (nE_B + nE_C + nE_N - E_{BCN})/3n$, E_B 、 E_C 、 E_N 和 E_{BCN} 分别为每个 B 原子、C 原子、N 原子和二维 BCN 单胞结构的能量。计算得到二维 BCN 的凝聚能为 8.41 eV/atom,对比实验上合成的 BCN- γ 结构的凝聚能理论计算值(8.61 eV/atom)^[16],说明我们预测的 BCN 结构是一种亚稳相结构。但是该结构凝聚能高于实验上合成的硅烯(3.98 eV/atom) 和锗烯(3.26 eV/atom)^[25]中每个原子凝聚能的理论值,因此,二维 BCN 在实验上是可能合成的。另外,通过计算二维 BCN 的声子谱来分析其动力学稳定性,如图 1(c) 所示,在整个布里渊区,声子的振动频率均大于零,说明二维 BCN 满足动力学稳定性条件。

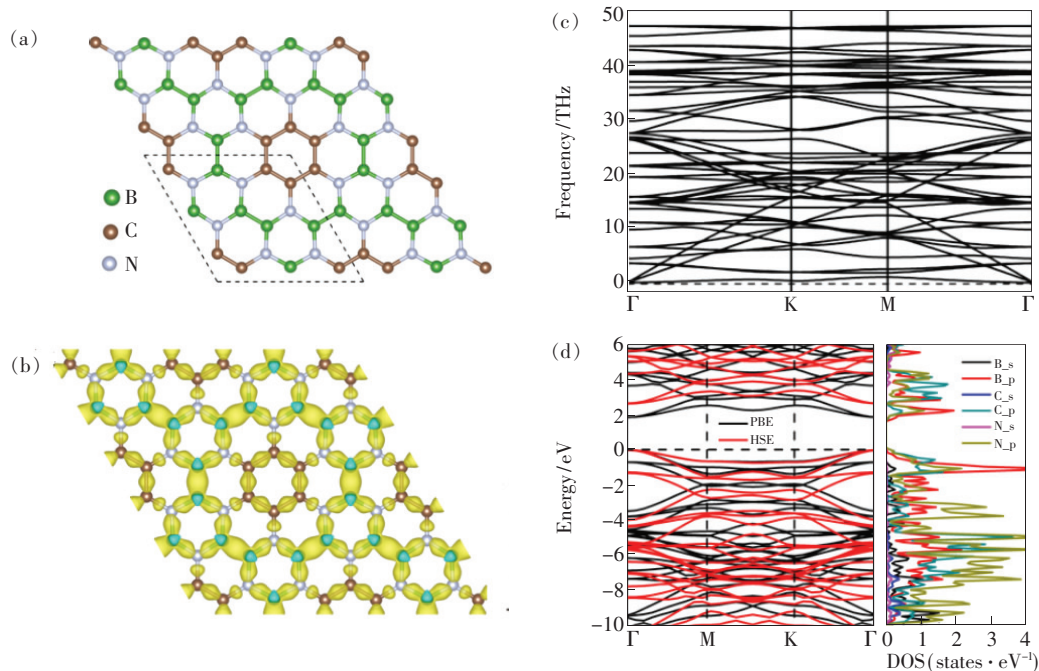


图 1 (a)二维 BCN 单层的结构图,B、C 和 N 原子分别用绿色、棕色和灰色球表示;(b)二维 BCN 的差分电荷密度,等能面值: $15 \text{ e} \cdot \text{nm}^{-3}$,金色: $\Delta\rho > 0$,青色: $\Delta\rho < 0$;(c)二维 BCN 单层的声子谱;(d)二维 BCN 单层的能带结构和投影态密度。

Fig. 1 (a) Structure of two dimensional BCN. B, C and N atoms are represented by green, brown and gray spheres, respectively. (b) Difference charge density of BCN. The gold color (*i. e.*, $15 \text{ e} \cdot \text{nm}^{-3}$) in the plot indicates an electron density increase in the electron density after bonding. (c) Phonon dispersion of BCN. (d) Electronic band structure calculated using the PBE and HSE functional with the projected density of states.

为了进一步评估二维 BCN 结构在一定温度下的热力学稳定性, 我们采用从头算分子动力学 (AIMD) 方法计算 BCN 在 1 200 K 时能量随时间变化关系, 如图 2 所示。能量随时间呈现一定的波动关系, 但是能量的平均值几乎保持不变, 并且经过 8 ps 后结构仍然保持完整的六角结构, 说明 BCN 在 1 200 K 具有较高的热力学稳定性。

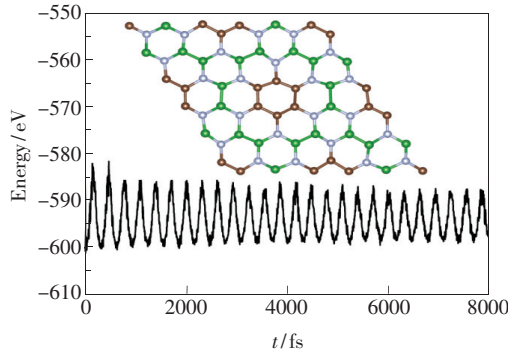


图 2 BCN 在 1 200 K 的温度下能量随时间变化关系。插图表示分子动力学模拟后 BCN 的结构。

Fig. 2 Fluctuation of total potential energy of BCN during the AIMD simulation at 1 200 K. The inset represents the structure of BCN at the end of the AIMD simulation.

3.2 二维 BCN 电子结构和载流子迁移率

二维 BCN 的能带结构和投影态密度如图 1(d) 所示。从能带结构图不难分析 BCN 为直接带隙半导体, 价带顶和导带底均位于 Γ 点, 利用 PBE 泛函计算得到 BCN 的带隙值为 1.84 eV。由于密度泛函对带隙的低估, 我们采用了混合密度泛函 (HSE) 进行修正, 计算得到 BCN 带隙为 2.60 eV。BCN 结构的电子投影态密度的研究表明价带顶和导带底均是由 B、C、N 的 2p 轨道占据。通过进一步的分析表明价带顶有少部分 B 的 2s 电子占据, 价带顶到导带底的跃迁是 BCN 产生吸收的主要原因。

载流子迁移率是衡量半导体材料性能的一个重要参数, 为此, 我们计算了二维 BCN 新结构的载流子迁移率, 由于 BCN 是六角结构, 我们需要将六角结构转变为矩形结构, 转变后的结构如图 3(a) 中矩形虚线图所示。矩形晶胞的建立主要是为了研究载流子沿着“之”字方向和“扶手”方向上的迁移率。计算迁移率之前, 依据晶胞的能带与晶胞在倒空间 K 点的能带色散关系计算载流子沿着两个方向上的有效质量, 计算公式如下:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial E^2 / \partial k^2}, \quad (1)$$

根据该公式计算得到二维 BCN 电子和空穴沿着“之”字边和“扶手”边方向上的有效质量分别为 $0.578m_0$ ($0.551m_0$) 和 $0.518m_0$ ($0.493m_0$), m_0 为电子静止时的质量。有效质量的大小是决定载流子大小的一个重要因素, 一般来说有效质量越小, 载流子传输得越快。

根据计算得到的有效质量, Bardeen 和 Shockley^[26] 提出了依据形变势理论计算载流子迁移率的公式^[27]。表达式为:

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

其中 m^* 是载流子的有效质量, m_d 是载流子沿着“之”字方向和“扶手”方向上的平均有效质量, 通过 $m_d = \sqrt{m_x m_y}$ 获得, m_x 和 m_y 分别表示载流子在“之”字方向和“扶手”方向上的有效质量。T 为室温 300 K, E_l^i 是载流子在“之”字边方向和“扶手”边方向上的带阶形变势, 计算过程中, 采用应力下结构的价带顶和导带底能量减去真空能级得到价带顶和导带底的相对值, 然后通过对价带顶和导带底的线性拟合得到一次项系数。C_{2d} 是沿着“之”字边方向和“扶手”边方向上的弹性模量, 通过对能量-应变之间的关系式 $2(E - E_0)/S_0 = C_{2d} \times (\Delta l/l_0)^2$ 进行二次函数拟合得到, E 、 E_0 、 S_0 分别是应变下的总能量、晶体参数无应变时的能量和无应变时的表面积。

晶体总能量沿“之”字边和“扶手”边的应变关系如图 3(b) 所示, 利用 origin 对二次函数进行拟合得到“之”字边和“扶手”边方向的二维弹性模量分别为 297.63, 296.14 N/m。因为价带顶和导带底是应变的函数, 其关系如图 3(c)、(d) 所示, 对该关系进行线性拟合的一次项系数 E_l^i 如表 1 所示。计算得到的 E_l^i 、 C_{2d} 、 m^* 、 μ 列在表 1 中, 二维 BCN 在“之”字边和“扶手”边方向上的电子迁移率分别为 $632.5, 923.3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 而空穴在两个方向上的迁移率为 $765.7, 622.6 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 。影响迁移率的主要因素是形变势、弹性常数和载流子的有效质量。对于我们预测的 BCN 结构, 由于载流子的有效质量高于 BCN- α 、BCN- β 和 BCN- γ 的有效质量, 因此, 载流子迁移率小于这几种相结构的迁移率, 但是明显高于二维 MoS₂ 的载流子迁移率 ($\sim 200 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)^[28]。

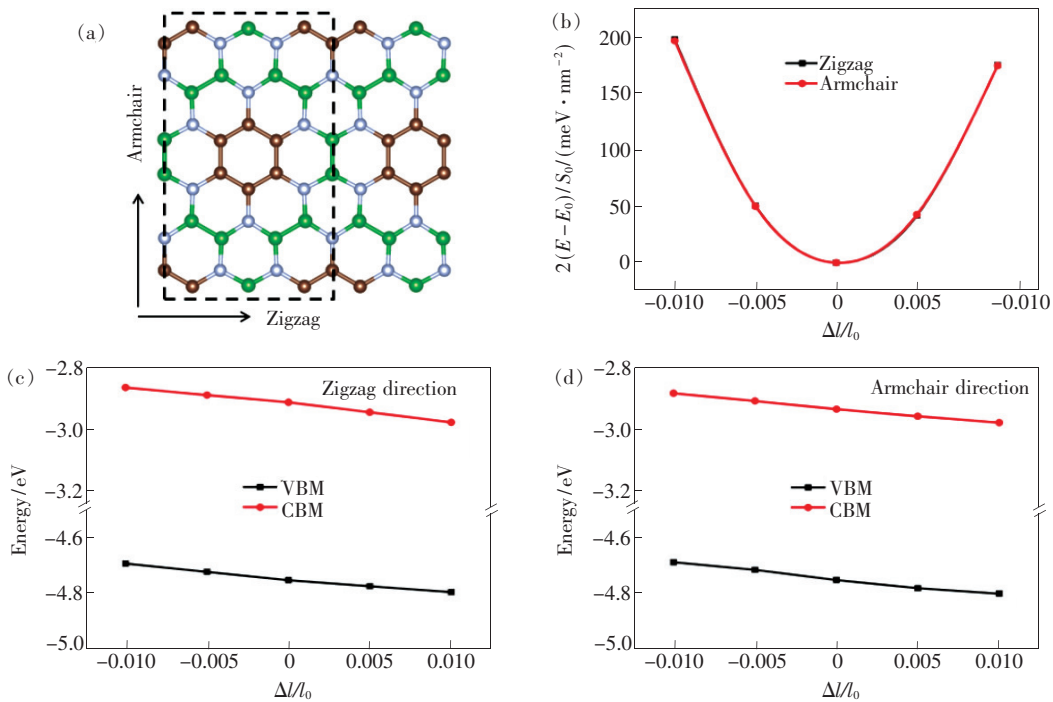


图 3 (a) 二维 BCN 单层的矩形结构图; (b) 晶体能量沿着“扶手”边和“之”字边的应变关系; (c) 价带顶和导带底沿着“之”字边方向的应变关系; (d) 价带顶和导带底沿着“扶手”边方向的应变关系。

Fig. 3 (a) Schematic of the strain along zigzag and armchair direction. (b) Total energy shift as a function of lattice deformation. (c) Shift of the conduction band and valence band under uniaxial strain along the zigzag direction. (d) Shift of the conduction band and valence band under uniaxial strain along the armchair directions.

表 1 二维 BCN 沿“之”字边和“扶手”边方向的形变势 E_I 、弹性常数 C_{2d} 、有效质量 m^*/m_0 、电子 e 和空穴 h 的迁移率 μ
Tab. 1 Calculated deformation potential constant E_I , elastic modulus C_{2d} , effective mass m^*/m_0 , mobility for electron (e) and hole (h) along zigzag and armchair directions at 300 K

方向	载流子	E_I /eV	$C_{2d}/(\text{N} \cdot \text{m}^{-1})$	m^*/m_0	m_d	$\mu/(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$
Zigzag	e	-5.63	297.63	0.578	0.547	632.5
	h	-5.37	297.63	0.551	0.521	765.7
Armchair	e	-4.91	296.14	0.518	0.547	923.3
	h	-6.28	296.14	0.493	0.521	622.6

3.3 二维 BCN 光学性质

介电函数反映的是材料对外加电场的影 响以及电子结构在能带-能带之间转变的关系,充分反映固体能带结构和各种光谱特性。介电函数由实部 $\epsilon_R(\omega)$ 和虚部 $\epsilon_i(\omega)$ 构成,其中的虚部表示物质对光的吸收,实部可以通过 K - K 方程变换^[29] 得到,表示电子跃迁的共振吸收。图 4(a) 是计算得到的 BCN 的介电函数随光子能量变化关系,其中介电函数实部随光子能量增加逐渐增大,意味着介质极化程度不断增加,然后再急剧减小,BCN 对电荷的束缚能力逐渐减弱。虚部曲线在

$\sim 2.61, 4.04, 6.04, 12.17$ eV 处出现 4 个主要峰值,结合能带图可以发现出现峰值时的光子能量与能带结构带隙之间存在的微小差异主要是由于电子跃迁产生的弛豫。

根据介电函数,可以获得材料的折射率、反射谱、吸收谱、光电导率和能量损失函数,其中折射率与介电函数之间的关系为 $\epsilon_R = n^2 - k^2$, $\epsilon_i = 2nk$, 公式中 k 为消光系数, n 为折射率,根据折射率可以推断该频率下介质的透明程度。折射率和消光系数随光子能量的变化关系如图 4(b) 所示,光子能量在 ~ 1.77 eV 时 BCN 出现了最大折射率

为 1.81, 而后逐渐减小, 最后稳定在 0.80。图 4(c) 是光的反射谱, 在光子能量为 2.60, 4.32, 6.64 eV 时, BCN 对应的反射率分别为 11.5%、10.5% 和 5.4%。由此可见, 在可见光区域 BCN 最高可以反射 11.5% 的入射光。另外, 我们对光的吸收系数进行了计算, 如图 4(d) 所示, 吸收谱的峰值对应的光子能量分别在 2.89, 4.25, 6.34, 12.34 eV 位置处, 与介电函数虚部的峰值相吻合。

对于反映光学性质的光电导率, 可以通过介电函数的虚部得到, 关系如下: $\sigma_R(\omega) = \varepsilon_0 \omega \varepsilon_i(\omega)$,

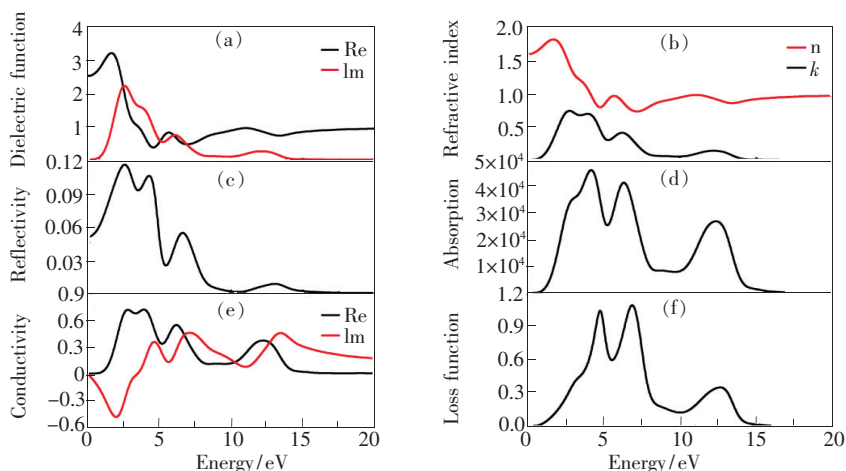


图 4 二维 BCN 结构的介电常数(a)、折射率(b)、反射谱(c)、吸收谱(d)、电导率(e)和介电损失函数(f)。

Fig. 4 Two dimensional BCN for dielectric function(a), refractive index(b), reflectivity(c), absorption spectra(d), conductivity(e) and dielectric loss function(f).

4 结 论

通过粒子群优化算法和第一性原理计算, 我们预测了一种新的 B、C、N 原子排列的 BCN 结构, 该结构是由 C_6 环、 B_3N_3 环以及 $B_2C_2N_2$ 环构成。对凝聚能声子谱的计算表明二维 BCN 不仅在热力学上是稳定的, 在动力学上也是稳定的。通过 HSE 方法对能带结构的计算表明预测的二维 BCN 新结构是禁带宽度为 2.60 eV 的直接带隙半导体。根据形变势理论, 我们对 BCN

其中 σ_R 表示光电导的实部。图 4(e) 为二维半导体 BCN 的光电导率, Re 和 Im 分别为光电导率的实部和虚部。根据光电导率和介电函数之间的关系不难发现光电导率的实部反映的是价带和导带之间电子跃迁的结果。因此, 光电导实部峰值的位置与介电函数和吸收谱均是对应的。通过介电函数的实部和虚部可以得到 BCN 的能量损失函数, 如图 4(f) 所示, BCN 的最大能量损失峰位于 4.80, 6.94, 12.57 的光子能量处, 对应折射率的谷值。由于 B、C、N 原子产生较强烈的共振, 从而产生较多的能量损失。

的迁移率进行了计算, 二维 BCN 在“之”字边和“扶手”边方向上的载流子迁移率范围为 $622 \sim 923 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 。光学性质计算分析表明, BCN 的介电函数虚部峰值同吸收谱和光电导率的实部峰值吻合得很好, 可见光范围内的吸收峰主要集中在光子能量为 $\sim 2.60 \text{ eV}$ 处, 主要归因于电子从价带顶到导带底的跃迁。电学性质和光学性质的研究奠定了 BCN 在电子和光电子器件方面潜在的应用前景, 为进一步实验提供了理论参考。

参 考 文 献:

- [1] MIRÓ P, AUDIFFRED M, HEINE T. An atlas of two-dimensional materials [J]. *Chem. Soc. Rev.*, 2014, 43(18): 6537-6554.
- [2] 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.

- [3] LU J P, CARVALHO A, CHAN X K, *et al.*. Atomic healing of defects in transition metal dichalcogenides [J]. *Nano Lett.*, 2015, 15(5):3524-2532.
- [4] PARK H, KIM T K, CHO S W, *et al.*. Large-scale synthesis of uniform hexagonal boron nitride films by plasma-enhanced atomic layer deposition [J]. *Sci. Rep.*, 2017, 7(1):40091.
- [5] ANASORI B, XIE Y, BEIDAGHI M, *et al.*. Two-dimensional, ordered, double Transition Metals Carbides (MXenes) [J]. *ACS Nano*, 2015, 9(10):9507-9516.
- [6] ZHAN X X, SI C, ZHOU J, *et al.*. MXene and MXene-based composites: synthesis, properties and environment-related applications [J]. *Nanoscale Horiz.*, 2020, 5(2):235-258.
- [7] BRENT J R, SAVJANI N, LEWIS E A, *et al.*. Production of few-layer phosphorene by liquid exfoliation of black phosphorus [J]. *Chem. Commun.*, 2014, 50(87):13338-13341.
- [8] LI L K, YU Y J, YE G, *et al.*. Black phosphorus field-effect transistors [J]. *Nat. Nanotechnol.*, 2014, 9(5):372-377.
- [9] LU W L, NAN H Y, HONG J H, *et al.*. Plasma-assisted fabrication of monolayer phosphorene and its Raman characterization [J]. *Nano Res.*, 2014, 7(6):853-859.
- [10] CHENG L K, MENG J H, PAN X J, *et al.*. Two-dimensional hexagonal boron-carbon-nitrogen atomic layers [J]. *Nanoscale*, 2019, 11(21):10454-10462.
- [11] RAO C N R, GOPALAKRISHNAN K. Borocarbonitrides, $B_xC_yN_z$: synthesis, characterization, and properties with potential applications [J]. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2017, 9(23):19478-19494.
- [12] PAN H Z, SUN Y Y, ZHENG Y P, *et al.*. B_4CN_3 and B_3CN_4 monolayers as the promising candidates for metal-free spintronic materials [J]. *New J. Phys.*, 2016, 18(9):093021
- [13] BENIWAL S, HOOPER J, MILLER D P, *et al.*. Graphene-like boron-carbon-nitrogen monolayers [J]. *ACS Nano*, 2017, 11(3):2486-2493.
- [14] ZHU J, BHANDARY S, SANYAL B, *et al.*. Interpolation of atomically thin hexagonal boron nitride and graphene: electronic structure and thermodynamic stability in terms of all-carbon conjugated paths and aromatic hexagons [J]. *J. Phys. Chem. C*, 2011, 115(20):10264-10271.
- [15] RAIDONGIA K, NAG A, HEMBRAM K P S S, *et al.*. BCN: a graphene analogue with remarkable adsorptive properties [J]. *Chem. Eur. J.*, 2010, 16(1):149-157.
- [16] AZEVEDO S, DE PAIVA R. Structural stability and electronic properties of carbon-boron nitride compounds [J]. *EPL (Europhys. Lett.)*, 2006, 75(1):126-132.
- [17] ZHANG H J, LI X T, MENG X F, *et al.*. Isoelectronic analogues of graphene: the BCN monolayers with visible-light absorption and high carrier mobility [J]. *J. Phys. Condens. Matter*, 2019, 31(12):125301.
- [18] WANG Y C, LV J, ZHU L, *et al.*. Crystal structure prediction *via* particle-swarm optimization [J]. *Phys. Rev. B*, 2010, 82(9):094116.
- [19] WANG Y C, LV J, ZHU L, *et al.*. CALYPSO: a method for crystal structure prediction [J]. *Comput. Phys. Commun.*, 2012, 183(10):2063-2070.
- [20] KRESSE G, FURTHMULLER J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set [J]. *Phys. Rev. B*, 1996, 54(16):11169-11186.
- [21] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, 77(18):3865-3868.
- [22] HEYD J, SCUSERIA G E, ERNZERHOF M J. Hybrid functionals based on a screened coulomb potential [J]. *Chem. Phys.*, 2003, 118(18):8207-8215.
- [23] BLÖCHL P E. Projector augmented-wave method [J]. *Phys. Rev. B*, 1994, 50(24):17953-17979.
- [24] TOGO A, TANAKA I. First principles phonon calculations in materials science [J]. *Scr. Mater.*, 2015, 108:1-5.
- [25] YANG L M, BAČIĆ V, POPOV I A, *et al.*. Two-dimensional Cu_2Si monolayer with planar hexacoordinate copper and silicon bonding [J]. *J. Am. Chem. Soc.*, 2015, 137(7):2757-2762.
- [26] BARDEEN J, SHOCKLEY W. Deformation potentials and mobilities in non-polar crystals [J]. *Phys. Rev.*, 1950, 80(1):72-80.
- [27] XI J Y, LONG M Q, TANG L, *et al.*. First-principles prediction of charge mobility in carbon and organic nanomaterials

- [J]. *Nanoscale*, 2012,4(15):4348-4369.
- [28] CAI Y Q,ZHANG G,ZHANG Y W. Polarity-reversed robust carrier mobility in monolayer MoS₂ Nanoribbons [J]. *J. Am. Chem. Soc.*, 2014,136(17):6269-6275.
- [29] 沈学础. 半导体光谱和光学性质 [M]. 第 2 版. 北京:科学出版社, 2002.
- SHEN X C. *The Spectrum and Optical Property of Semiconductor* [M]. 2nd ed. Beijing:Science Press, 2002. (in Chinese)



濮春英(1979 -),女,黑龙江安达人,博士,副教授,2012 年于大连理工大学获得博士学位,主要从事功能材料结构预测与光电性质的研究。

E-mail: puchunying@126.com