

Cr 二维单层薄片中 Jahn-Teller 效应的第一性原理研究

张薇 陈凯彬 陈震东

First-principles study on Jahn-Teller effect in Cr monolayer film

Zhang Wei Chen Kai-Bin Chen Zhen-Dong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 237301 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20181669

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20181669>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I23>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

石墨烯纳米结构的制备及带隙调控研究

Fabrication of graphene nanostructure and bandgap tuning

物理学报.2017, 66(21): 217301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.217301>

石墨烯吸附 Li 团簇的第一性原理计算

The first-principle calculation on the Li cluster adsorbed on graphene

物理学报.2017, 66(5): 057301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.057301>

双势垒抛物势阱磁性隧道结隧穿磁阻及自旋输运性质的研究

Study on tunneling magnetoresistance effects in parabolic well magnetic tunneling junction with double barriers

物理学报.2016, 65(15): 157301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.157301>

单轴压力下 $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ (X=Sb, Bi) 薄膜拓扑相变的第一性原理研究

First-principles study on the uniaxial pressure induced topological quantum phase transitions of $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ (X =Sb, Bi) thin films

物理学报.2015, 64(10): 107301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.107301>

磁场中的拓扑绝缘体边缘态性质

Edge mode of InAs/GaSb quantum spin hall insulator in magnetic field

物理学报.2015, 64(9): 097302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.097302>

Cr二维单层薄片Jahn-Teller效应的 第一性原理研究*

张薇^{1)2)†} 陈凯彬¹⁾ 陈震东¹⁾

1) (福建师范大学物理与能源学院, 福建省量子调控与新能源材料重点实验室, 福州 350117)

2) (福建省半导体光电材料及其高效转换器件协同创新中心, 厦门 361005)

(2018年9月7日收到; 2018年10月1日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的第一性原理计算, 本文对Cr单层薄片的一系列二维结构(长方、正方、六角、斜方和中心长方晶格)进行了结构稳定性和电子性质研究. 结果表明, 在Cr的二维体系中, 对称性较低的斜方晶格和中心长方晶格是稳定的, 对称性较高的正方和六角晶格是不稳定的, 而长方晶格的形成能很小. Cr二维原子薄片的两种稳定结构都是六角结构畸变的结果, 六角晶格的键角减小时会形变成斜方晶格, 键角增大时会形变成中心长方晶格, 这是由于Jahn-Teller效应使简并能级自发破缺, 继而结构产生降低对称性的形变, 最终使得体系变得稳定.

关键词: Jahn-Teller效应, 单层, 第一性原理计算

PACS: 73.20.At, 73.22.-f, 73.61.At

DOI: 10.7498/aps.67.20181669

1 引言

二维材料具有许多奇妙的物理效应和广阔的应用前景, 有望应用于纳米器件、透明导电材料、电子逻辑器件、能量存储材料^[1]和自旋电子器件等. 石墨烯是一种典型的二维材料, 仅由C元素构成并且具有单原子层结构. 2004年, 单层石墨烯首次在实验中被成功剥离^[2], 打破了先前的假设: 平面石墨烯相对于富勒烯和纳米管等曲面结构是不稳定的, 不存在其自由状态. 2015年, 单层WS₂和WSe₂在实验中由熔盐法成功制备^[3]. 2018年, 47种二维过渡金属硫化物薄层再次于实验中由熔盐法辅助化学气相沉积方法成功制备, 包括单层NbSe₂, MoTe₂, MoS₂, PtSe₂, WTe₂, ReSe₂, V_xW_yMo_{1-x-y}S_{2z}Se_{2(1-z)}合金等^[4]. 随着实验技术的不断进步和成熟, 对处于自由状态的二维单层原子晶体的探索已经引起了人们越来越多的关注.

近年来, 研究者对Cu低维体系^[5], Nb二维原子薄片^[6], W原子薄片^[7]、铁原子薄片^[8]、锗烯^[9]、锡烯^[10]、硅烯^[11]以及二维蜂窝状金^[12]等二维体系进行了理论研究. 对二维Cr薄膜的理论计算可以帮助探究其处于低维结构时的晶格结构和电子性质. 采用基于密度泛函理论的第一性原理计算, 本文首先计算了一个原子层厚度的Cr薄膜分别处于长方、正方、六角、斜方和中心长方晶格下的结构稳定性和能带结构性. 然后, 进一步计算了单层Cr薄膜的电子态密度和总电荷密度等性质. 最后, 讨论了Jahn-Teller效应对d轨道电子占据情况的影响, 揭示了其稳定结构形成的机理.

2 理论计算方法

采用基于密度泛函理论的第一性原理计算软件包VASP^[13,14] (Vienna *ab initio* simulation package).

* 国家自然科学基金(批准号: 11504051)和福建省杰出青年科学基金(批准号: 2018J06001)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhangw721@163.com

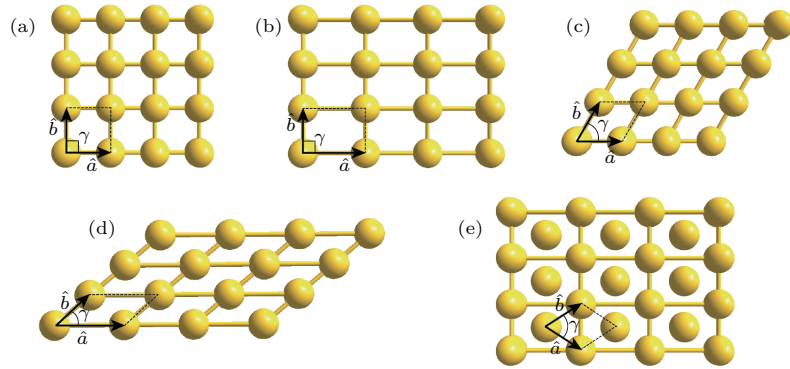


图1 二维Cr原子薄片的不同结构和原胞 (a) 正方晶格 ($a = b, \gamma = 90^\circ$); (b) 长方晶格 ($a \neq b, \gamma = 90^\circ$); (c) 六角晶格 ($a = b, \gamma = 60^\circ$); (d) 斜方晶格 ($a \neq b, \gamma \neq 90^\circ$); (e) 中心长方晶格 ($a = b, \gamma \neq 60^\circ, 90^\circ$)

Fig. 1. Crystal structures and primitive cells for various 2D chromium atomic sheets: (a) Square lattice ($a = b, \gamma = 90^\circ$); (b) rectangular lattice ($a \neq b, \gamma = 90^\circ$); (c) hexagonal lattice ($a = b, \gamma = 60^\circ$); (d) oblique lattice ($a \neq b, \gamma \neq 90^\circ$); (e) centered rectangular lattice ($a = b, \gamma \neq 60^\circ, 90^\circ$).

该软件包采用平面波展开, 映射缀加波势 (projector augmented-wave potentials, PAW) [15,16] 以及广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) [17]. 我们计算了Cr的一系列二维布拉赫格子 (正方晶格、长方晶格、六角晶格、斜方晶格和中心长方晶格), 晶格结构如图1所示. 真空层大小设置为 15 Å, 平面波截断能量设置为 400 eV, 布里渊区积分采用 Monkhorst-Pack 方法 [18], k 点网格选取为 $15 \times 15 \times 1$, 电子占据数 f_{nk} 采用 Blöch 修正的四面体方法来处理 [19].

3 结果与讨论

3.1 结构性质与 Jahn-Teller 效应

首先, 计算得到Cr二维原子薄片所有可能结构的晶格常数和结合能, 进而根据结合能来判断各结构是否可以稳定存在. 计算得到体心立方Cr

晶格常数为 2.83 Å, 与常温常压下Cr的晶格常数 2.88 Å [20] 较符合. 然后, 研究Cr的所有二维晶体结构 (包括正方、长方、六角、斜方和中心长方晶格, 如图1所示), 结构优化后所得的晶格常数和结合能列在表1中.

从表1可以看到, 二维结构的配位数均小于体结构的配位数. 二维Cr的中心长方结构的键角比六角结构的大 13.6°, 键长比六角的键长小 0.12 Å, 结合能比六角的大 0.09 eV/atom. Cr的斜方结构的键角比六角结构的小 11°, 平均键长比六角的长 0.16 Å, 结合能与中心长方结构的结合能相等, 但比六角结构的结合能大 0.09 eV/atom. 另外, 正方结构的结合能比中心长方和斜方晶格结构 (结合能最高) 的小 0.06 eV/atom, 比六角结构大 0.03 eV/atom. 这说明Cr的二维结构中, 斜方结构和中心长方结构比六角结构、正方结构稳定.

表1 Cr原子薄片在不同二维结构下的平衡晶格常数和结合能
Table 1. Lattice constants and cohesive energies E_b for various 2D chromium atomic sheets.

结构	$a/\text{Å}$	$b/\text{Å}$	$\gamma/(\text{°})$	$E_b/\text{eV}\cdot\text{atom}^{-1}$	配位数	结构稳定性
正方	2.16		90.0	3.08	4	不稳定
长方	1.79	5.93	90.0	1.31	2	不稳定
六角	2.32		60.0	3.05	6	不稳定
斜方	2.52	2.44	49.0	3.14	≈ 6	稳定
	2.48(平均键长)					
中心长方	2.20		73.6	3.14	≈ 6	稳定
Cr体结构	2.83		90.0	5.20	8	稳定

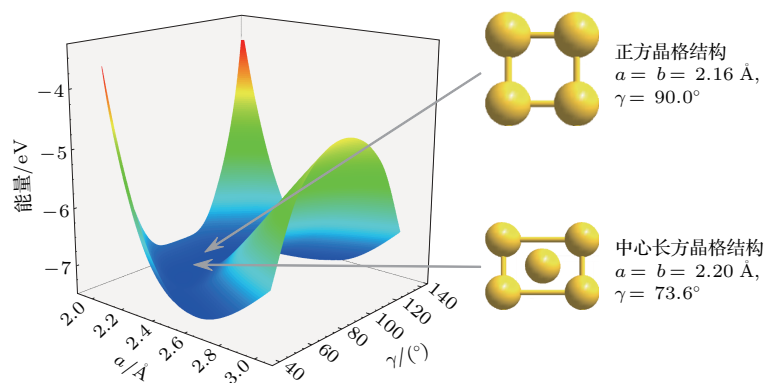


图2 Cr二维体系总能量相对于晶格常数/键角的变化
 Fig. 2. Total energy of 2D Cr system changes with lattice constants and bond angle.

接下来, 具体计算体系能量随键角和晶格常数的变化, 结果以三维曲面图展现, 如图2所示. x 轴代表晶格常数 $a(\text{Å})$, y 轴代表基矢 \mathbf{a} 和 \mathbf{b} 的夹角 $\gamma(^{\circ})$, z 轴表示体系总能量(用颜色梯度标识能量, 颜色越深说明体系的总能量越低). 由图2可以看出, Cr的二维正方结构在能量曲面上对应的位置为鞍点, 故Cr的正方晶格结构是不稳定结构; 而中心长方结构对应的是曲面的谷, 因此中心长方结构是稳定的.

为了更直观地看出体系总能量随结构参数的变化规律, 进一步绘出图2的二维投影图, 即不同结构参数的能量等高线, 如图3所示. 在图3中可以看到两个颜色最深的椭圆面, 代表总能量最低的体系, 分别为二维中心长方结构和二维斜方结构, 再次证明这两种结构是二维稳定结构.

由于Jahn-Teller效应, 在Cr的不同二维结构中, 结构对称性较低的中心长方结构和斜方结构的结合能大于对称性较高的六角结构的结合能. 可以这样理解, 二维Cr的六角结构的键角 γ 沿着大于

或小于 60° 的方向畸变, 使结构的体系对称性降低, 结构畸变为稳定的中心长方结构或者斜方晶格结构. 简并的能级被破坏, 结构产生畸变, 使体系能量变得更低.

所有二维结构的Cr原子薄片的结合能都比体心立方Cr的低, 这与晶格结构中原子成键的难易程度有关. 从表1中的键长来看, Cr的所有二维结构的键长都小于体结构体心立方的键长, 说明二维薄片原子间的成键比体结构的更强. 接下来分析不同结构Cr的配位数情况. 一般地, 金属的结合能随配位数增大而增大. Cr的体结构的配位数最高为8, 结合能也最高(5.20 eV/atom). Cr的二维正方结构配位数最低, 结合能也较低, 为3.08 eV/atom. Cr二维斜方和中心长方晶格结构的结合能都为3.14 eV/atom, 大于正方结构的结合能, 小于体结构的结合能. 这是因为正方结构的配位数为4, 斜方和中心长方结构的配位数为6, 而体材料的配位数为8.

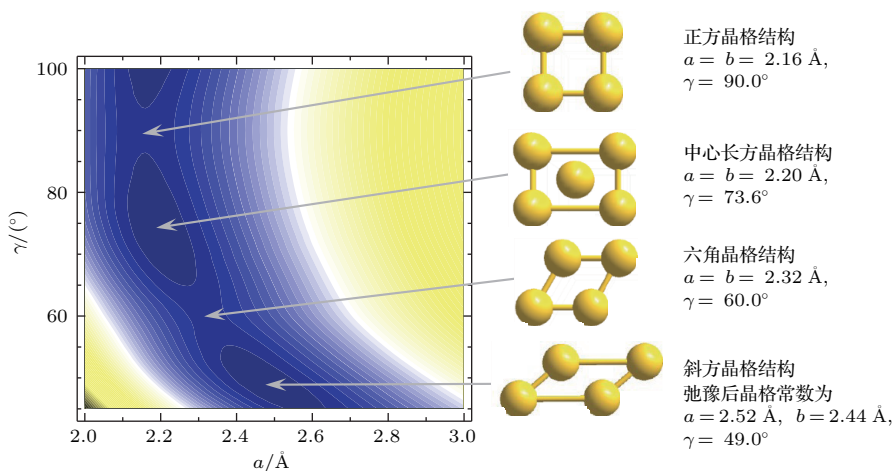


图3 Cr二维体系能量的等高线图
 Fig. 3. Energy contour map of Cr 2D system.

3.2 电子结构性质分析

下面通过电子结构进一步研究Cr二维体系中的Jahn-Teller效应. 图4为Cr不同结构的能带图, 可以看出各结构均有能带穿过费米能级, 反映了体结构及各种二维结构Cr的金属性. 二维晶格的Cr体系有比较多的能带穿过费米能级, 而体心立方晶格穿过费米能级的能带数则较少. 以图4(c)的二维六角晶格Cr为例, 它的能带在费米能级附近被部分填充, 部分填充的能带具有简并性或近似简并

性. 这种简并能级会由于自发破缺, 使结构向对称性低的结构形变, 从而使体系变为能量更加稳定的状态. 因此, 对称性低的中心长方和斜方结构比六角结构更加稳定. 和体结构对比, 二维结构的能带变窄, 这一方面是由于维度的降低导致电子运动受到限制, 使得价电子的运动受到强的约束; 另一方面是由于二维结构配位数降低, 外场对电子的束缚减弱, 使得电子能量上升, 能带向费米面发生移位, 从而使费米面附近的电子态密度有所增加.

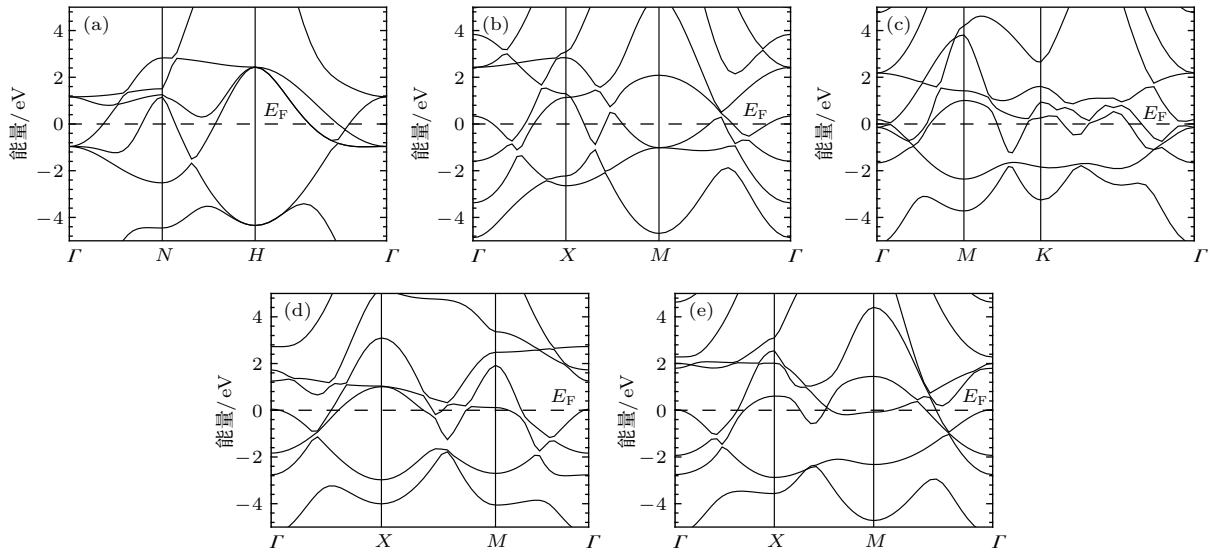


图4 Cr不同结构的能带图 (a)体结构; (b)二维正方晶格; (c)二维六角晶格; (d)二维斜方晶格; (e)二维中心长方晶格
 Fig. 4. Energy bands for different Cr structures: (a) Bulk lattice; (b) 2D square lattice; (c) 2D hexagonal lattice; (d) 2D oblique lattice; (e) 2D centered rectangular lattice.

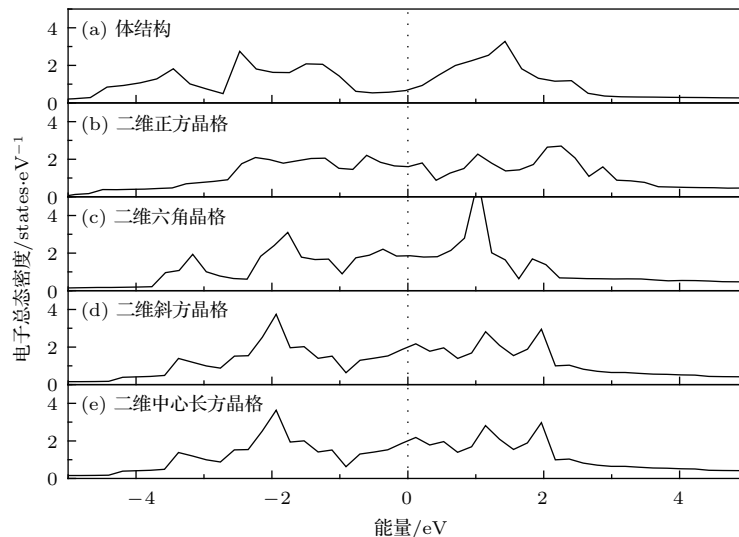


图5 Cr不同结构的总电子态密度图 (a)体结构; (b)二维正方晶格; (c)二维六角晶格; (d)二维斜方晶格; (e)二维中心长方晶格
 Fig. 5. Total electronic density of states for various Cr structures: (a) Bulk lattice; (b) 2D square lattice; (c) 2D hexagonal lattice; (d) 2D oblique lattice; (e) 2D centered rectangular lattice.

接下来计算各种不同结构的Cr体系的电子态密度. 在费米能级处, Cr的体结构(体心立方)及各种二维晶格结构的总电子态密度均不为零, 反映了这几种结构都是金属性的, 这与能带计算结果一致(如图5所示). 相较于体心立方Cr体系中电子态密度的分布, 二维各种结构在费米面附近电子态占据均变多. 对费米能级以下的电子态密度积分可以得到二维斜方Cr和二维中心长方Cr费米能级下填充的电子数比二维六角Cr多, 导致整个体系的总能变低. 这正是由于Jahn-Teller效应破缺了六角结构的能级简并性, 体系结构转变为两种对称性较低的稳定结构.

3.3 电荷密度及轨道电子占据情况分析

图6是Cr体心立方(100)和(110)晶面、各种二维晶格结构的电荷密度等高线图. 从图6可见, 二维结构的电荷密度图与体结构相似, 并且二维结构的成键没有明显的方向性. 体结构电荷密度等高

线呈球形对称, 二维正方结构的电荷密度等高线略微偏离球形对称, 二维斜方和二维中心长方晶格的电荷密度等高线与球形偏离较大, 产生一定畸变.

最后计算Cr二维结构(六角、斜方和中心长方)各个轨道在费米面下的电子占据数目, 结果如表2所列. 由表2可见, 二维六角Cr的 d_{xy} 和 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上各占据约1个电子, 轨道是简并的, 能量较低; d_{yz} , d_{z^2} 和 d_{xz} 轨道上各占据电子约0.7个, 轨道也是简并的, 能量较高. 五条d轨道共占据电子数4.191. 当二维六角Cr畸变为二维中心长方晶格时, 五条d轨道的电子占据数分别为0.997, 0.418, 1.34, 0.740, 0.828, 总数为4.323. 因此, Jahn-Teller效应导致系统对称性降低, 解除了 d_{xy} 和 $d_{x^2-y^2}$ 的能级简并, 也解除了 d_{yz} , d_{z^2} 和 d_{xz} 的能级简并, 导致总电子占据数增多, 体系能量降低. 当体系畸变为二维斜方结构时, 五条d轨道的电子占据数分别为1.08, 0.928, 0.734, 0.828, 0.978, 总数为4.557. 同样地, Jahn-Teller效应解除

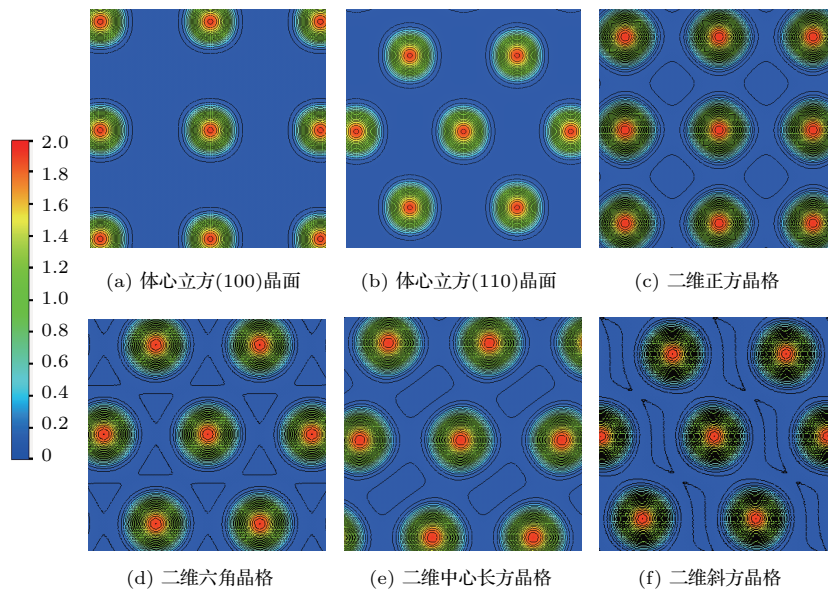


图6 Cr不同结构的电荷密度等高线二维投影图 (a) 体心立方(100)晶面; (b) 体心立方(110)晶面; (c) 二维正方晶格; (d) 二维六角晶格; (e) 二维中心长方晶格; (f) 二维斜方晶格

Fig. 6. 2D charge density contour of various Cr structures: (a) bcc lattice (100); (b) bcc lattice (110); (c) 2D square lattice; (d) 2D hexagonal lattice; (e) 2D centered rectangular lattice; (f) 2D oblique lattice.

表2 Cr的二维六角、斜方和中心长方晶格各个轨道电子占据数目

Table 2. Electron occupation numbers of orbitals in 2D hexagonal, rhombic and central rectangular Cr.

结构	d_{xy}	d_{yz}	d_{xz}	d_{z^2}	$d_{x^2-y^2}$	总电子数
六角/电子	1.01	0.730	0.735	0.716	1.00	4.191
斜方/电子	1.08	0.928	0.743	0.828	0.978	4.557
中心长方/电子	0.997	0.418	1.34	0.740	0.828	4.323

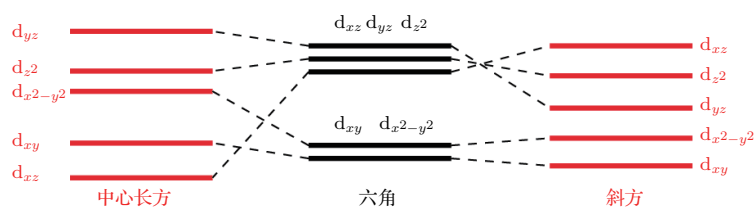


图7 Cr二维中心长方、六角和斜方的d轨道能级分裂

Fig. 7. D-orbital energy splitting in 2D central rectangular, hexagonal and oblique structures of Cr.

了 d_{xy} 和 $d_{x^2-y^2}$ 的能级简并, 也解除了 d_{yz} , d_z^2 和 d_{xz} 的能级简并, 总电子占据数亦增多, 体系能量降低. 所以, Jahn-Teller 效应使能级简并解除, 导致 Cr 畸变为稳定的二维中心长方和二维斜方晶格结构.

为了更直观地理解 Jahn-Teller 效应的影响, 绘出六角 Cr 畸变为二维中心长方和二维斜方晶格时 d 轨道能级分裂情况的示意图, 如图 7 所示.

如上所述, 二维 Cr 原子晶体两种稳定的结构都是二维六角结构畸变的结果, 二维六角结构的键角 γ 增大形变成二维中心长方结构, 键角 γ 减小形变成二维斜方结构. 由此可见, Jahn-Teller 效应对二维原子薄片的结构稳定性起到了决定性作用. 实验制备二维结构可以用外延法将单层膜生长在基底材料上来稳定其结构. 由于二维斜方和中心长方结构是由六角结构畸变而来的, 所以这两种结构及六角晶格的基底材料可选为 Ni^[21], Cu(111)^[22] 等.

4 结 论

采用基于密度泛函理论的第一性原理, 本文计算了 Cr 原子薄片所有二维结构的电子结构性质, 分析了它们的成键特点, 能带结构以及电荷密度分布、d 轨道占据情况等特征. 计算结果表明 Jahn-Teller 效应对二维结构的稳定性和电子结构具有显著影响. 由于 Jahn-Teller 效应, Cr 的二维正方晶格和二维六角晶格是不稳定的, 二维中心长方晶格和二维斜方晶格是稳定的. 这是因为 Jahn-Teller 效应使体系对称性降低, 解除了晶格的简并, 结构畸变成对称性较低的二维中心长方晶格和二维斜方晶格结构. 以上对 Cr 单层薄片的研究有助于二维体系的材料设计及实验合成, 亦为纳米器件的研发和制备指明了方向.

参考文献

[1] Chhowalla M, Shin H S, Eda G, Li L, Loh K P, Zhang H 2013 *Nat. Chem.* **5** 263

[2] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666

[3] Li S S, Wang S F, Tang D M, Zhao W J, Xu H L, Chu L Q, Bando Y, Golberg D, Eda G 2015 *Appl. Mater. Today* **1** 60

[4] Zhou J D, Lin J H, Huang X W, Zhou Y, Chen Y, Xia J, Wang H, Xie Y, Yu H M, Lei J C, Wu D, Liu F C, Fu Q D, Zeng Q S, Hsu C H, Yang C L, Lu L, Yu T, Shen Z X, Lin H, Yakobson B I, Liu Q, Suenaga K, Liu G T, Liu Z 2018 *Nature* **556** 355

[5] Wang G C, Yuan J M 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 970 (in Chinese) [王贵春, 袁建民 2003 物理学报 **52** 970]

[6] Chen L Z, Wang X C, Wen Y H, Zhu Z Z 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2920 (in Chinese) [陈鲁倬, 王晓春, 文玉华, 朱梓忠 2007 物理学报 **56** 2920]

[7] Lin Q B, Zhang J H, Wen Y H, Zhu Z Z 2008 *J. Xiamen Univ. (Nat. Sci.)* **47** 657 (in Chinese) [林秋宝, 张建华, 文玉华, 朱梓忠 2008 厦门大学学报 **47** 657]

[8] Gao T H, Lu D M, Wu S Q, Zhu Z Z 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 047502 (in Chinese) [高潭华, 卢道明, 吴顺情, 朱梓忠 2011 物理学报 **60** 047502]

[9] Liu C C, Feng W X, Yao Y G 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 76802

[10] Xu Y, Yan B H, Zhang H J, Wang J, Xu G, Tang P Z, Duan W H, Zhang S C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 136804

[11] Ezawa M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 55502

[12] Liu N, Jin S F, Guo L W, Wang G, Shao H Z, Chen L, Chen X L 2017 *Phys. Rev. B* **95** 155311

[13] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558

[14] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169

[15] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953

[16] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758

[17] Perdew J P, Chevary J A, Vosko S H, Jackson K A, Pederson M R, Singh D J, Fiolhais C 1992 *Phys. Rev. B* **46** 6671

[18] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188

[19] Blöchl P E, Jepsen O, Andersen O K 1994 *Phys. Rev. B* **49** 16223

[20] TonKov E T, Ponyatovsky E G 2005 *Phase Transformations of Elements Under High Pressure* (Boca Raton: CRC Press) pp242–244

[21] Olle M, Ceballos G, Serrate D, Gambardella P 2012 *Nano Lett.* **12** 4431

[22] Robertson A W, Warner J H 2011 *Nano Lett.* **11** 1182

First-principles study on Jahn-Teller effect in Cr monolayer film*

Zhang Wei^{1)2)†} Chen Kai-Bin¹⁾ Chen Zhen-Dong¹⁾

1) (*Fujian Provincial Key Laboratory of Quantum Manipulation and New Energy Materials, College of Physics and Energy, Fujian Normal University, Fuzhou 350117, China*)

2) (*Fujian Provincial Collaborative Innovation Center for Optoelectronic Semiconductors and Efficient Devices, Xiamen 361005, China*)

(Received 7 September 2018; revised manuscript received 1 October 2018)

Abstract

Computational physics has been used in many scientific research fields, in which first-principles calculation based on density functional theory has made brilliant achievements. Unlike three-dimensional materials, low-dimensional materials present fantastic physical effect, due to the reduction of material dimensions. With the rapid development of two-dimensional materials, people have a more in-depth understanding of them. Requirements for high performance of two-dimensional materials are raised for potential applications, so the exploration of some effects affecting the stability of two-dimensional materials becomes more and more important. Based on the pioneers' work, Jahn-Teller effect is found to have a certain influence on the stabilities of two-dimensional structure of some elements. In the present paper, we explain the stable structure of Cr monolayer film through theoretical calculation, providing a guidance for experimental synthesis. Using first-principles calculation, we study a series of two-dimensional structures (rectangular, square, hexagonal, oblique and centered rectangular) of Cr monolayer film, focusing on the structural stability and electronic properties. Firstly, the equilibrium lattice constant and cohesive energy of each structure are calculated. Then, the bond angle and lattice constant dependence of the total energy are analyzed in detail. Finally, we investigate the energy band structures, total electronic densities of states, charge densities and electron occupation numbers of orbitals. The results show that low-symmetry oblique and centered rectangular lattice are stable in the two-dimensional system of Cr, while high-symmetry square and hexagonal lattices are not stable and the adhesive energy of the rectangular lattices is very small. Two stable structures of Cr monolayer sheet are formed due to hexagonal structure distortion. The hexagonal structure can shape into a centered rectangular structure with the increase of bond angle, while it changes into an oblique structure with the decrease of bond angle. Because of Jahn-Teller effect, the degenerate energy level spontaneously splits. Then the structure deforms into two reduced-symmetry structures, resulting in a stable system. Therefore, we can infer that the Jahn-Teller effect plays a crucial role in the structural stability of monolayer sheet.

Keywords: Jahn-Teller effect, monolayer, first-principles calculation

PACS: 73.20.At, 73.22.-f, 73.61.At

DOI: [10.7498/aps.67.20181669](https://doi.org/10.7498/aps.67.20181669)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11504051) and the Science Fund for Distinguished Young Scholars of Fujian Province, China (Grant No. 2018J06001).

† Corresponding author. E-mail: zhangw721@163.com