

外加电场和 B/N 掺杂对锡烯带隙的影响*

吕永杰¹⁾ 陈燕²⁾ 叶方成¹⁾ 蔡李彬¹⁾ 戴子杰¹⁾ 任云鹏^{1)†}

1) (江苏大学机械工程学院, 镇江 212013)

2) (江苏大学材料科学与工程学院, 镇江 212013)

(2023 年 12 月 8 日收到; 2024 年 1 月 8 日收到修改稿)

锡烯具有超高载流子密度、无质量狄拉克费米子和高导热性等优良性质, 并且存在能带反转现象, 被认为是拓扑绝缘体, 拓扑绝缘体在一定条件下可以获得无耗散电流, 具有极高的应用潜力. 由于锡烯在布里渊区高对称点 K 处的能带存在狄拉克锥, 带隙为零, 大大限制了锡烯在半导体领域的应用. 本文采用在锡烯中掺杂 B/N 元素和在垂直于锡烯平面方向施加电场的方法来打开锡烯在 K 点处的带隙, 并研究掺杂和施加电场强度对锡烯结构和电子性质的变化. 研究发现施加掺杂 B 元素和垂直电场都能在保留锡烯拓扑性质的同时打开 K 点处的带隙, 并且施加的垂直电场强度与 K 点处带隙呈正相关. 在掺杂 B 元素的同时施加垂直电场可以增大 K 点处的带隙, 当电场强度为 0.5 V/\AA 时, 带隙达到 0.092 eV . 掺杂 N 元素后, 锡烯变为间接带隙半导体, 带隙为 0.183 eV . 施加垂直电场不能改变 N 元素掺杂锡烯的结构, 施加的垂直电场强度与 K 点处带隙则呈负相关, 当电场强度为 0.5 V/\AA 时, K 点处带隙减小到 0.153 eV .

关键词: 锡烯, 拓扑绝缘体, 垂直电场, 掺杂**PACS:** 31.15.E, 65.40.-b, 67.85.De, 73.20.At**DOI:** 10.7498/aps.73.20231935

1 引言

自从 2004 年石墨烯发现以来, 二维材料的发展十分迅速. 以石墨烯为代表的二维材料拥有许多优异的性质, 如超高的载流子迁移率、无质量狄拉克费米子、高导热性和半整数霍尔电导等^[1-3]. 这些优良性质使得二维材料成为电子领域具有巨大发展潜力的材料.

2011 年, Liu 等^[4] 发现二维锡结构中存在能带反转现象, 存在量子自旋霍尔效应, 推测二维锡可能是拓扑绝缘体. 2013 年, Xu 等^[5] 将锡的类石墨烯材料命名为锡烯 (stanene). 锡烯的制备早在命名之前就有许多团队不断尝试, 但都未取得理想的结果. 直到 2015 年 Zhu 等^[6] 利用分子束外延的方法在 $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ 上成功制备出锡烯薄膜, 并通过

扫描隧道显微镜确认了其结构. 但是 $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ 衬底破坏了锡烯的电子结构, 使其失去了拓扑绝缘特性. 2016 年, Gao 等^[7] 通过第一性原理预测 Ag (111) 是锡烯外延生长的理想衬底, 2018 年 Yuhara 等^[8] 证明了 Gao 的预测, 并在 Ag (111) 实现了锡烯的大规模外延生长. 同年, Deng 等^[9] 利用低温分子束外延方法在 Cu (111) 面上制备了无褶皱的平面锡烯, 并使锡烯在自旋轨道耦合 (SOC) 作用下, 产生了 sp 轨道能带反转, 首次在实验中获得了具有拓扑绝缘性质的锡烯. 但高质量且层数准确可控的单晶锡烯薄膜生长依旧难以实现^[10].

与石墨烯中存在的 sp^2 杂化轨道不同, 锡烯中同时存在 sp^2 杂化和 sp^3 杂化轨道, 导致锡烯无法像石墨烯一样成为完美的平面结构, 而是存在一定的褶皱^[11]. 褶皱的存在使锡烯的热力学稳定性较差, 需在 77 K 以下才能稳定存在. 理论计算表明

* 江苏省自然科学基金 (批准号: BK20220519) 和江苏省高校自然科学研究项目 (批准号: 22KJB140002) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: renyp@ujs.edu.cn

锡烯是一种拓扑绝缘体^[12], 拓扑绝缘体的体内与绝缘体一样, 是绝缘的, 但在它的边界或表面总是存在导电的边缘态^[13], 当外部施加一定强度的电场时, 产生的自旋极化电流会沿着拓扑绝缘体的边缘或表面无阻力地流动, 形成一种无阻碍的电子输送通道, 获得无耗散电流. 尽管锡烯有很多优良的性质, 但由于锡烯在布里渊区高对称点 K 点处存在狄拉克锥, 导致其带隙为零, 大大限制了锡烯的应用. 为了调控锡烯的性质, 打开锡烯在 K 点处的带隙至关重要. 本文在前人研究的基础上^[14,15], 采用施加垂直电场和掺杂等方法, 在保持锡烯拓扑性质的同时, 打开了锡烯在 K 点处的带隙.

2 计算方法

本文采用基于密度泛函理论 (DFT)^[16] 的第一性原理平面波方法进行模拟研究, 使用 Materials Studio 软件包中的 CASTEP 模块进行计算. 交换关联泛函选用的是广义梯度近似 (GGA) 中的 Perdew-Bueke-Ernzerh (PBE) 泛函^[17,18]. 采用模守恒赝势 (norm conserving)^[19] 来描述核外电子和原子核的作用势. 为了获得较高的精度, 经过收敛性测试后, 截断能取值为 600 eV, 体系选用的是 $5 \times 5 \times 1$ 的超晶胞, 布里渊区的数值积分在结构优化过程中采用 $5 \times 5 \times 1$ Gamma-pack k -point 法^[20], 在计算能带时, 采用的 $15 \times 15 \times 1$ 的网格对能带进行计算. 优化算法选用的是 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) 法^[21]. 自洽循环的收敛极限设为 1.0×10^{-6} eV/Å. 结构优化过程中, 两步之间的总能量的收敛极限为 10^{-5} eV/atom, 最大应力收敛极限为 0.02 eV/Å, 当自洽循环中数值小于这三个设定值时候, 结构收敛, 结构优化完成. 声子谱的计算使用线性响应法 (linear response)^[22], 收敛极限设为 1.0×10^{-5} eV/Å². 由于是二维材料, 计算时需要加上厚度为 20 Å 的真空层, 避免层与层之间的相互作用.

3 结果与讨论

锡烯结构如图 1 所示, 优化后 Sn—Sn 之间的键长 l 为 2.81 Å, 晶格常数 $a = b = 4.67$ Å, 键角 θ 为 110.85° , 与之前的研究结果吻合^[23-25]. 由于锡烯中 Sn—Sn 之间的 π 键连接较弱, 所以锡烯不像

石墨烯一样是完全平坦的结构, 而是以褶皱的形式存在. 结构最高点和最低点的垂直距离称为屈曲, 优化后锡烯的屈曲 $d = 0.88$ Å.

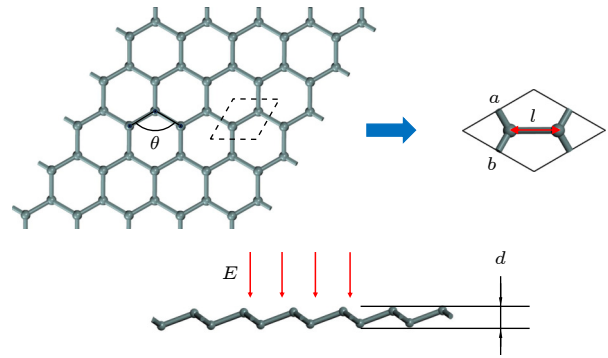


图 1 锡烯优化后的结构图, 上方是锡烯结构主视图, 下方是锡烯结构的侧视图, 其中 θ 为锡烯键角, a 和 b 为锡烯晶格常数, l 为 Sn—Sn 键长, E 为外加电场, d 为锡烯的屈曲
Fig. 1. Optimized structure of stanene and doped stanene. The top part is the top view of the structure of stanene, the bottom part is side view of the structure of stanene, where θ represents the bond angle of stanene, a and b represent the lattice constants of stanene, l represents the Sn—Sn bond length, E represents electric field, d represents the buckling of stanene.

锡烯的能带图如图 2(a) 所示. 从图中可以发现, 锡烯的能带在高对称点 Γ 点处存在较大带隙, 而在 K 点处存在狄拉克锥, 带隙为 0 eV. 从能带图中看出锡烯具有时间反演对称性, 时间反演不变点是 K 点和 K' 点, 两个相互关联的时间反演不变点在费米能级上形成了二重简并, 同时由于时间反演不变存在, 能带在布里渊区关于 Γ 点镜面对称, 从 Γ 点到 K 点, 能带穿过奇数次费米面 (K 点处), 即存在奇数个边缘态, 根据 Fu 和 Kane^[26] 的简便方法可得, 锡烯的拓扑不变量 $Z_2 = 1$, 所以锡烯为拓扑绝缘体. 图 2(b) 是锡烯的声子散射图, 弛豫状态下, 锡烯有 6 条声子支, 分别是光学纵波 (LO)、面内光学横波 (TO)、面外光学横波 (ZO)、声学纵波 (LA)、面内声学横波 (TO) 和面外声学横波 (ZA). 由于锡烯结构存在褶皱, 导致垂直锡烯平面方向上的对称性被破坏, 造成锡烯在 Γ 点处线性色散. 这使得锡烯 Γ 点处的 ZA, TA, LA 声子支表现出线性色散^[27]. 由于声子色散图不存在虚部, 因此可以认为锡烯结构是稳定的^[28].

有研究表明, 施加电场能有效调节能带带隙^[29]. 在垂直锡烯平面的方向上施加 0—0.5 V/Å 的电场, 计算结果表明锡烯的拓扑结构 (包括 Sn—Sn 键长,

屈曲和晶格常数)几乎不变(如图3(a)所示),但锡烯在 K 点处的带隙被打开(如图3(b)所示). 其原因是外加电场会引入一个电势差,使电子能级上升或下降,导致价带和导带之间的能量差异增加,从而增大了能带带隙. 从图3(c)中可以看到, K 点处带隙和电场强度呈正相关. 其原因是伴随着电场强度的增大,锡烯褶皱上下层原子之间的电荷转移量呈线性增大,从而打开的带隙值也就越大. 带隙的增大意味着材料的导电性会降低,使得锡烯从金属性转变为半导体性. 当电场强度为 0.5 V/\AA 时, K 点处带隙达到最大值,为 0.07 eV . Γ 点处的带隙以及锡烯整体能带基本没有变化,因此确定施加电场后的结构仍然是拓扑绝缘体.

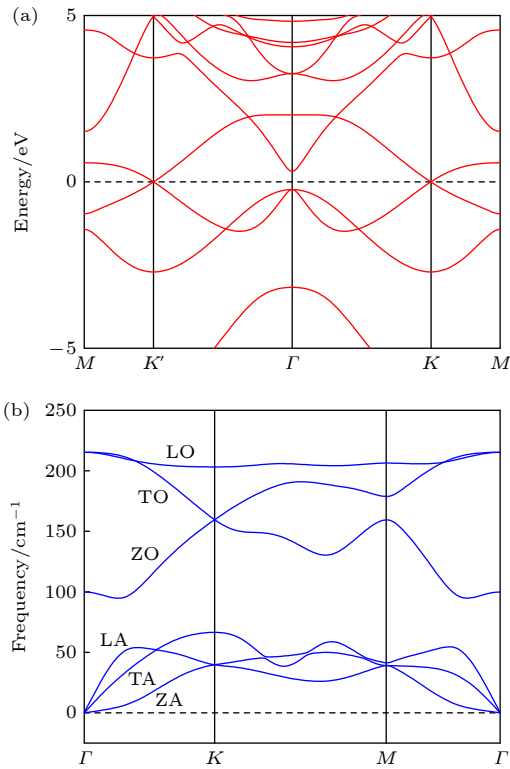


图2 (a) 锡烯的能带图, 费米能级设在 0 eV 处; (b) 无应力锡烯的声子谱, 从下到上依次为 ZA, TA, LA, ZO, TO 和 LO

Fig. 2. (a) Band structure of stanene, the Fermi level is set to zero; (b) phonon spectrum of stress-free stanene, which are ZA (acoustic out-of-plane mode), TA (acoustic in-plane transverse mode), LA (acoustic in-plane longitudinal mode), ZO (optical out-of-plane mode), TO (optical in-plane transverse mode), LO (optical in-plane longitudinal mode), respectively from bottom to top.

掺杂元素也是打开锡烯在 K 点处带隙的有效方法^[15], 掺杂的元素一般选择 III 族(如硼、铝、镓等)或 V 族元素(如氮、磷、砷等), 因为 III 族和 V 族

元素与锡烯具有相近的晶格结构, 可以在不破坏晶格完整性的情况下引入掺杂. 通过引入少量 III 族或 V 族元素, 可以引发锡烯电子结构以及电导率的改变, 从而增加锡烯的带隙. 本研究分别对锡烯进行 2% B 元素和 2% N 元素掺杂, 即在锡烯 5×5 的超晶胞(50 个 Sn 原子)中将一个 Sn 原子替换为 B/N 原子.

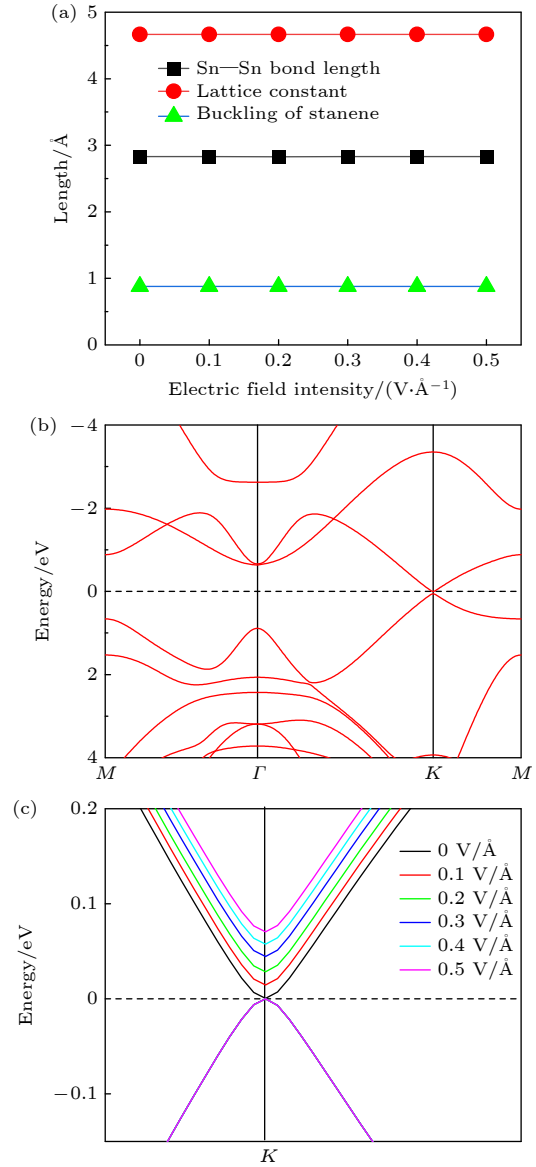


图3 (a) 电场强度为 $0-0.5 \text{ V/\AA}$ 时锡烯晶格常数、Sn—Sn 键长和屈曲的变化; (b) 电场强度为 0.5 V/\AA 时锡烯的能带图; (c) 电场强度为 $0-0.5 \text{ V/\AA}$ 时锡烯在 K 点处的带隙, 费米能级设在 0 eV 处

Fig. 3. (a) The change of lattice constant, Sn—Sn bond length, and buckling of stanene under the electric field ranging from 0 to 0.5 V/\AA ; (b) the band gap of stanene under the electric field of 0.5 V/\AA ; (c) the band gap at the K point of stanene under the electric field ranging from 0 to 0.5 V/\AA . The Fermi level is set to zero.

由于锡烯单胞中两个 Sn 原子位置对等, 所以 B 原子的不同掺杂位点对结果没有影响. B 掺杂后的锡烯结构如图 4(a) 所示. Sn—B 键长为 2.18 Å, 相比于 Sn—Sn 键明显变短, B 原子附近的各个原子之间键长产生了不同程度的拉伸, 越接近 B 原子拉伸越明显. 这种键长变化表明 B 原子与 Sn 原子之间的相互作用较强, 产生畸变的原因是 B 原子半径小于 Sn 原子半径. 从图 4(b) 中 B 掺杂锡烯的差分电荷密度图可以发现, B 原子附近 Sn 原子的电荷明显转移到 B 原子附近, 表明 Sn—B 之间相互作用明显强于 Sn—Sn 之间的相互作用. B 原子附近 Sn 原子之间高低差有一定程度的降低, 整体的屈曲为 0.87 Å, 与锡烯的结构相比没有发生太大改变. Sn—B 键的形成使锡烯的电子结构出现了杂质能级, 这些杂质能级可以影响锡烯的电子结构, 从而改变其带隙和导电性质. 从图 4(c) 的能带图可以看到, 掺杂 B 元素后, 锡烯的带隙被打开, 大小为 0.026 eV, 其价带顶和导带底都在 K 点, 为直接带隙, M 点和 Γ 点处间隙完全打开, 同时能带简并性更强, B 掺杂后锡烯仍然是拓扑绝缘体. 根据图 4(d) 所示的声子色散图, 虚频为 $10.9i \text{ cm}^{-1}$

(M 点处), 根据 Zhou 等^[30]和 Zhang 等^[31]的研究, 这么小的虚频可以忽略不计, 因此该结构是稳定的.

N 掺杂锡烯结构如图 5(a) 所示, 掺杂后 Sn—N 之间键长为 2.04 Å, N 掺杂结构同样也发生了拉伸, 并且拉伸程度比 B 掺杂更加明显, 这说明 N 原子与 Sn 原子之间的相互作用比 B 原子与 Sn 原子的相互作用更强. 由于拉伸程度变大, 导致 N 掺杂锡烯的屈曲变大, 达到了 0.92 Å, 这表明 N 掺杂引起了锡烯结构的明显变化, 这种形变可能与 N 原子的尺寸和电子云的分布有关. 通过比较 N 掺杂锡烯 (图 5(b)) 和 B 掺杂锡烯的差分电荷密度图 (图 4(b)) 可以发现 N 原子获得电荷的能力强于 B 原子, 这表明 Sn—N 之间的相互作用强于 Sn—B 之间的相互作用. 通过能带图可以发现掺杂 N 后, 锡烯的晶格结构被破坏, 狄拉克锥消失, 能带的价带顶在 M 点处, 导带底在 K 点处, 出现了间接带隙, 其大小为 0.183 eV, 为普通半导体, 而非拓扑绝缘体. 从图 5(d) 所示的声子色散图, 可以看到存在 $8.6i \text{ cm}^{-1}$ (K 点处) 的虚频, 小于 $10i \text{ cm}^{-1}$, 可以忽略不计, 说明该结构可稳定存在.

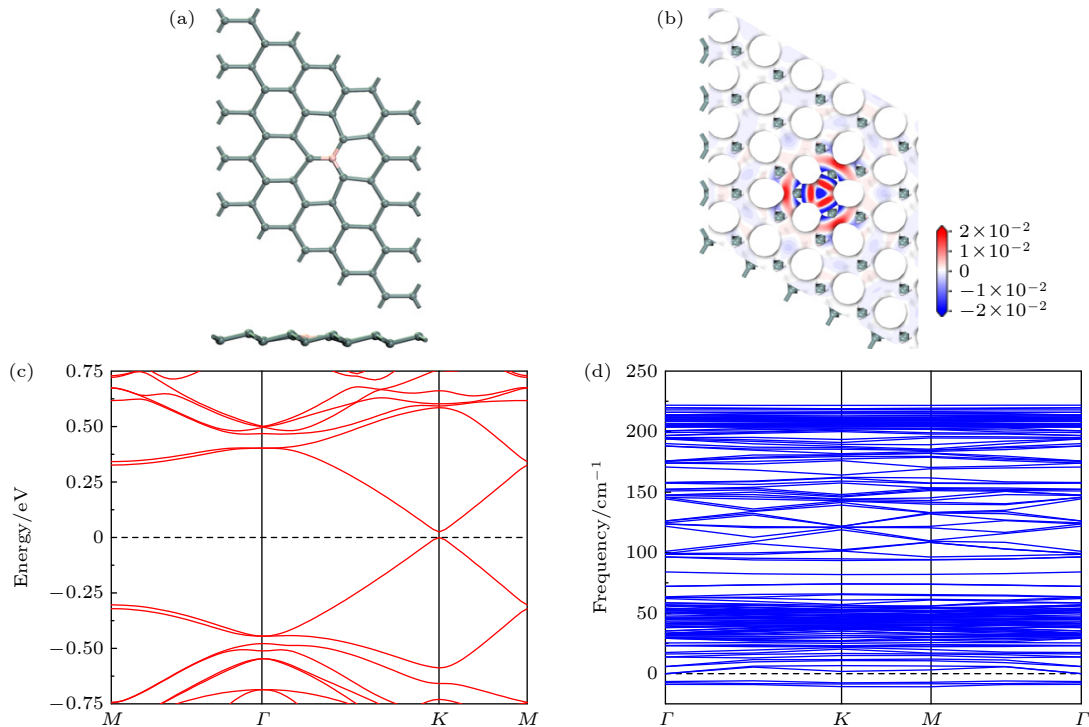


图 4 (a) B 掺杂锡烯优化后的结构图, 上方是 B 掺杂锡烯结构主视图, 下方是 B 掺杂锡烯结构的侧视图; (b) B 掺杂锡烯的差分电荷密度图; (c) B 掺杂锡烯的能带图; (d) B 掺杂锡烯的声子色散图

Fig. 4. (a) Optimized structure of B-doped stanene, the top part is the top view of the structure of B-doped stanene, the bottom part is side view of the structure of B-doped stanene; (b) electron density difference of B-doped stanene; (c) energy band of B-doped stanene; (d) phonon spectrum of stress-free B-doped stanene.

根据上述计算结果,发现 N 掺杂锡烯为普通半导体, B 掺杂锡烯为拓扑绝缘体. 在 B 掺杂锡烯的基础上,在垂直锡烯平面方向上施加电场,研究其带隙变化. 施加 0—0.5 V/Å 电场后, B 掺杂锡烯的键长,晶格常数和屈曲几乎没有发生改变,可见垂直电场不会改变 B 掺杂锡烯的晶体结构,但 K 点处的带隙随着电场强度的增大而变大,当垂直电场强度达到 0.5 V/Å 时, K 点处带隙达 0.092 eV

(如图 6(a) 所示). 在 N 掺杂锡烯的基础上,施加 0—0.5 V/Å 电场后,锡烯结构同样几乎没有发生改变,但随电场强度的增加, N 掺杂锡烯能带的导带底随电场强度的增加而下降,导致锡烯在 K 点处的带隙随电场强度增加而减小,当电场强度为 0.5 V/Å 时, K 点处带隙减小到 0.153 eV(图 6(b)). 电场强度的变化没有改变 N 掺杂锡烯的能带类型,施加电场后, N 掺杂锡烯仍然是普通半导体.

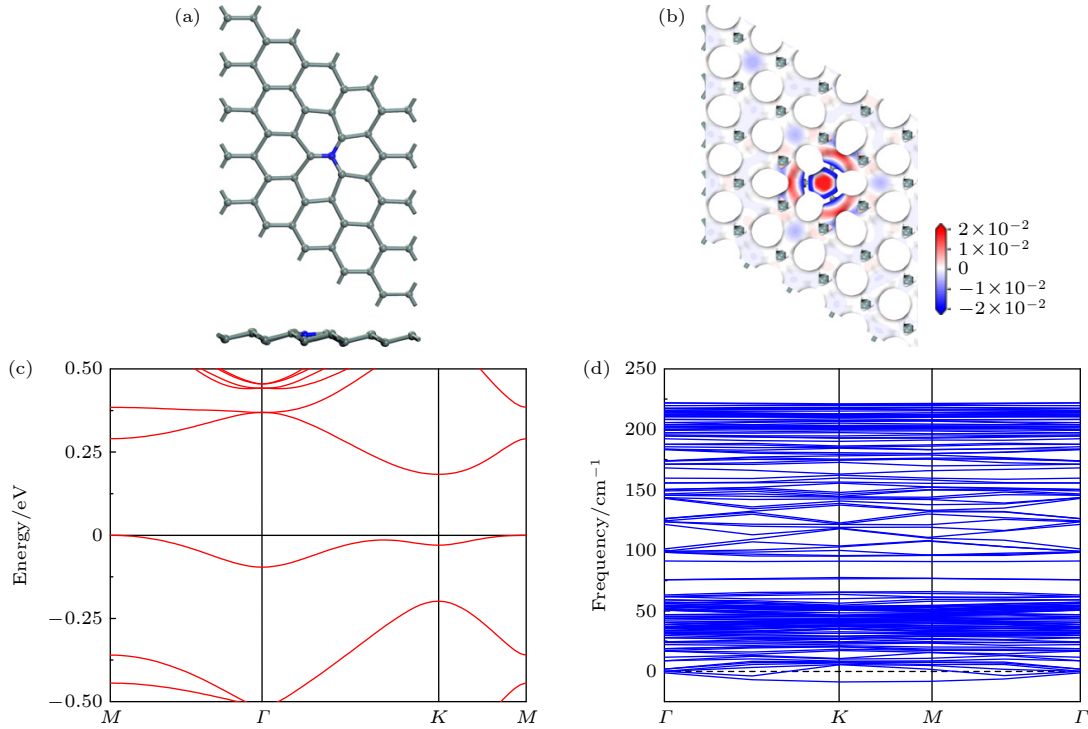


图 5 (a) N 掺杂锡烯优化后的结构图,上方是 N 掺杂锡烯结构主视图,下方是 N 掺杂锡烯结构的侧视图; (b) N 掺杂锡烯的差分电荷密度图; (c) N 掺杂锡烯的能带图; (d) N 掺杂锡烯的声子色散图

Fig. 5. (a) Optimized structure of N-doped stanene, the top part is the top view of the structure of N-doped stanene, the bottom part is side view of the structure of N-doped stanene; (b) electron density difference of N-doped stanene; (c) energy band of N-doped stanene; (d) phonon spectrum of stress-free N-doped stanene.

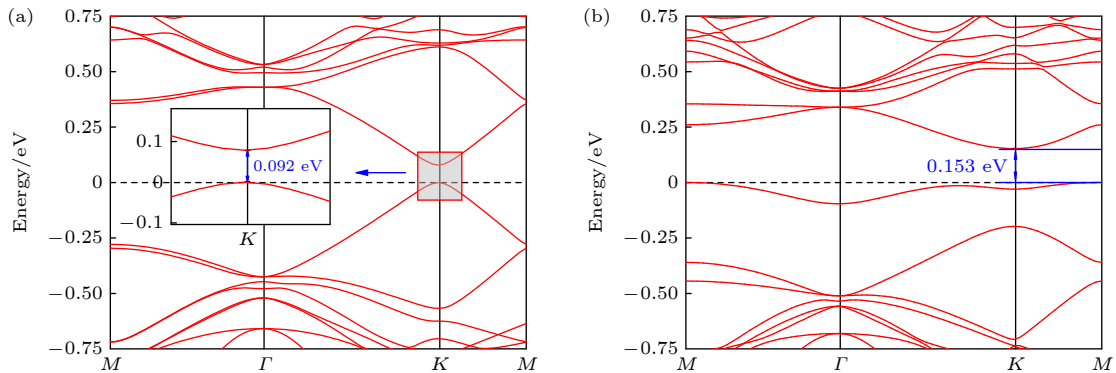


图 6 (a) 电场强度为 0.5 V/Å 时 B 掺杂锡烯的能带图; (b) 电场强度为 0.5 V/Å 时 N 掺杂锡烯的能带图,费米能级设在 0 eV 处
Fig. 6. (a) The band gap of B-doped stanene under the electric field of 0.5 V/Å; (b) the band gap of N-doped stanene under the electric field of 0.5 V/Å, the Fermi level is set to zero.

4 结 论

本研究采用掺杂 B/N 元素和施加电场的方法来打开锡烯在 K 点处的带隙. 结果表明, 掺杂 B 元素时, 锡烯在 K 点处的狄拉克锥得以保留, 仍然表现出拓扑绝缘体性质, 掺杂后带隙达到 0.026 eV. 掺杂 N 元素时, K 点处的狄拉克锥消失, 材料表现为普通半导体, 其带隙为 0.183 eV. 在掺杂 B 元素的基础上, 在垂直锡烯平面的方向上施加电场可以在不破坏结构的前提下, 进一步增大 K 点处的带隙. 带隙增大量与电场强度呈正相关. 当垂直电场强度达到 0.5 V/Å 时, 带隙达到 0.092 eV. 而在掺杂 N 元素的基础上施加垂直电场, 随着电场强度增大, 结构在 K 点处的带隙减小, 当垂直电场强度达到 0.5 V/Å 时, 带隙减小到 0.153 eV. 施加垂直电场后, N 掺杂锡烯结构仍然表现为普通半导体.

参考文献

- [1] Luo B, Wang B, Li X L, Jia Y Y, Liang M H, Zhi L J 2012 *Adv. Mater.* **24** 3538
- [2] Cahangirov S, Topsakal M, Akturk E, Sahin H, Ciraci S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 236804
- [3] Roome N J, Carey J D 2014 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **6** 7743
- [4] Liu C C, Jiang H, Yao Y G 2011 *Phys. Rev. B* **84** 195430
- [5] 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
- [6] Zhu F F, Chen W J, Xu Y, Gao C L 2015 *Nat. Mater.* **14** 1020
- [7] Gao J, Zhang G, Zhang Y W 2016 *Sci. Rep.* **6** 29107
- [8] Yuhara J, Fujii Y, Nishino K, Isobe N, Nakatake M, Xian L, Rubio A, Le Lay G 2018 *2D Mater.* **5** 025002
- [9] Deng J J, Xia B Y, Ma X C, Chen H Q, Shan H, Zhai X F, Li B, Zhao A D, Xu Y, Duan W H, Zhang S C, Wang B, Hou J G 2018 *Nat. Mater.* **17** 1081
- [10] Zheng X H, Zhang J F, Du R R 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 186401 (in Chinese) [郑晓虎, 张建峰, 杜瑞瑞 2022 物理学报 **71** 186401]
- [11] Qian D, Jia J F 2016 *Chin. Sci. Bul.* **61** 3252 (in Chinese) [钱冬, 贾金锋 2016 科学通报 **61** 3252]
- [12] Wu S C, Shan G, Yan B H 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 256401
- [13] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [14] Ren C C, Ji W X, Zhang C W, Li P, Wang P J 2016 *Mater. Res. Express* **3** 105008
- [15] Garg P, Choudhuri I, Mahata A, Pathak B 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 3660
- [16] Pribram Jones A, Pittalis S, Gross E, Burke K *Frontiers and Challenges in Warm Dense Matter* (Cham, Switzerland: Springer) pp25–60
- [17] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [18] 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
- [19] Hamann D R 2013 *Phys. Rev. B* **88** 085117
- [20] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [21] Liu D C, Nocedal J 1989 *Math. Program* **45** 503
- [22] Hänggi P, Thomas H 1982 *Phys. Rep.* **88** 207
- [23] Xing D X, Ren C C, Zhang S F, Feng Y, Chen X L, Zhang C W, Wang P J 2017 *Superlattices Microstruct.* **103** 139
- [24] Dai X Q, Zhao M Y, Zhao R M, Li W 2017 *Superlattices Microstruct.* **106** 33
- [25] Zhao C X, Jia J F 2020 *Front. Phys.* **15** 53201
- [26] Fu L, Kane C L 2007 *Phys. Rev. B* **76** 045302
- [27] Nika D, Pokatilov E, Askerov A, Balandin A A 2009 *Phys. Rev. B* **79** 155413
- [28] Baroni S, de Gironcoli S, Dal Corso A, Giannozzi P 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 515
- [29] Van den Broek B, Houssa M, Scalise E, Pourtois G, Afanas'ev V V, Stesmans A 2014 *2D Mater.* **1** 021004
- [30] Zhou J, Huang J, Sumpter B G, Kent P R C, Xie Y, Terrones H, Smith S C 2014 *J. Phys. Chem. C* **118** 16236
- [31] Zhang Z, Liu X, Yakobson B I, Guo W 2012 *J. Am. Chem. Soc.* **134** 19326

Influence of external electric field and B/N doping on the band gap of stanene*

Lü Yong-Jie¹⁾ Chen Yan²⁾ Ye Fang-Cheng¹⁾ Cai Li-Bin¹⁾
Dai Zi-Jie¹⁾ Ren Yun-Peng^{1)†}

¹⁾ (School of Mechanical Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China)

²⁾ (School of Materials Science and Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China)

(Received 8 December 2023; revised manuscript received 8 January 2024)

Abstract

Stanene possesses excellent properties, including an extremely high charge carrier density, massless Dirac fermions, and high thermal conductivity. Moreover, it exhibits band inversion phenomena, being made a candidate for a topological insulator. Topological insulators can generate dissipationless electric currents under certain conditions, showing great application potentials. However, the presence of a Dirac cone in the band structure of stanene at the high-symmetry point K in the Brillouin zone, resulting in a zero band gap, significantly limits its applications in the semiconductor field. This study adopts the method of doping B/N elements in stanene and applying an electric field perpendicular to the stanene to open the band gap at the K point. The effects of doping and the intensity of the applied electric field on the structural and electronic properties of stanene are investigated. The results reveal that both doping B elements and applying a vertical electric field can open the band gap at the K point while preserving the topological properties of stanene. Additionally, there is a positive correlation between the applied vertical electric field intensity and the band gap at the K point. Simultaneously doping B elements and applying a vertical electric field can increase the band gap at the K point, reaching 0.092 eV when the electric field intensity is 0.5 V/Å. After doping N elements, stanene is transformed into an indirect band gap semiconductor with a band gap of 0.183 eV. Applying a vertical electric field cannot change the structure of N-doped stanene, and the intensity of the applied vertical electric field is negatively correlated with the band gap at the K point. When the electric field intensity is 0.5 V/Å, the band gap at the K point decreases to 0.153 eV.

Keywords: stanene, topological insulator, perpendicular electric field, doping

PACS: 31.15.E, 65.40.-b, 67.85.De, 73.20.At

DOI: 10.7498/aps.73.20231935

* Project supported by the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK20220519) and the Natural Science Foundation of the Jiangsu Higher Education Institutions of China (Grant No. 22KJB140002).

† Corresponding author. E-mail: renyp@ujs.edu.cn



外加电场和B/N掺杂对锡烯带隙的影响

吕永杰 陈燕 叶方成 蔡李彬 戴子杰 任云鹏

Influence of external electric field and B/N doping on the band gap of stanene

Lü Yong-Jie Chen Yan Ye Fang-Cheng Cai Li-Bin Dai Zi-Jie Ren Yun-Peng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 083101 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20231935

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231935>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

InSb(111)衬底上外延生长二维拓扑绝缘体锡烯/铋烯的差异性研究

Comparative study on epitaxial growth of stanene and bismuthene on InSb(111) substrate

物理学报. 2022, 71(18): 186401 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221024>

圆偏振光场调控的锡烯纳米带热自旋输运

Circularly-polarized light controlled thermal spin transport in stanene nanoribbon

物理学报. 2021, 70(14): 147301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210197>

高性能太赫兹发射: 从拓扑绝缘体到拓扑自旋电子

High-performance THz emission: From topological insulator to topological spintronics

物理学报. 2020, 69(20): 200704 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200680>

不同方向局域交换场对锡烯自旋输运的影响

Effects of local exchange field in different directions on spin transport of stanene

物理学报. 2022, 71(14): 147201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220277>

强三维拓扑绝缘体与磁性拓扑绝缘体的角分辨光电子能谱学研究进展

Angle resolved photoemission spectroscopy studies on three dimensional strong topological insulators and magnetic topological insulators

物理学报. 2019, 68(22): 227901 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191450>

拓扑绝缘体中的超快电荷自旋动力学

Ultrafast charge and spin dynamics on topological insulators

物理学报. 2019, 68(22): 227202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191433>