

## 补充材料

二维 SiSnF<sub>2</sub> 中非磁性缺陷的影响和量子尺寸效应\*

刘文超 罗朝波 谢紫彤 彭向阳†

(湘潭大学物理与光电工程学院, 微纳能源材料与器件湖南省重点实验室,  
湘潭 411105)

本文的声子谱计算由 PHONOPY<sup>[S1,S2]</sup>代码结合使用 VASP 中的密度泛函扰动理论方法实现。为了确定二维 SiSnF<sub>2</sub> 的室温稳定性, 使用 VASP 进行了第一性原理分子动力学模拟。我们使用应变-能量法<sup>[S3]</sup>计算了体系的弹性常数, 体系的独立弹性常数列于表 S1 中。根据二维六角晶格的机械稳定性判据<sup>[4]</sup>,  $C_{11} > 0$ ,  $C_{11} > |C_{12}|$ , 可以知道体系在无应变和 5% 应变的情形下都满足判决, 是机械稳定的。计算了 SiSnF<sub>2</sub> 未加应变( $\epsilon = 0\%$ )及其应变( $\epsilon = 5\%$ )情况下的声子谱, 分别如图 S1(a)和图 S1(b)显示。可以看到, 所有的振动模式都是实频率, 这表明它们是动力学稳定的。

表 S1 无应变和 5% 应变情形下体系的弹性常数  
Table S1. Elastic constants of the system under 0% and 5% strained.

	$\epsilon$	
	0%	5%
$C_{11}/(\text{N m}^{-1})$	33.341	19.233
$C_{12}/(\text{N m}^{-1})$	7.544	5.155

为了研究 SiSnF<sub>2</sub> 单层的热稳定性, 使用第一性分子动力学, 对二维 SiSnF<sub>2</sub> 单层做了分子动力学模拟。我们使用了一个足够大的用于热平衡的 6×6 超胞, 一共 144 个原子。设置时间步长为 2 fs, 在 300 K 的温度下, 使用 NVT 系综, Nose-Hoover 热浴控温, 进行了 10 ps 的模拟。体系的总能量和温度波动随模拟

时间的变化如图 S1 (c) 和 S1 (d) 所示。体系的总能随模拟时间在均值-663.88 eV 附近波动, 波动幅度约为 5 eV, 小于 0.8%, 这是满足热平衡情况下的涨落的。Si—Sn, Si—F 和 Sn—F 的平均配位数分别为 3, 1 和 1, 并且 Si—Sn, Si—F 和 Sn—F 的平均键长分别为 2.70 Å, 1.65 Å 和 1.96 Å, 与基态下的结构参数进行比较, 表明 SiSnF<sub>2</sub> 的化学键没有破坏。我们检查最终的几何结构, 没有观察到结构重建或者被破坏。施加了 5% 应变的 SiSnF<sub>2</sub> 单层, 体系总能在均值-660.89 eV 附近波动, 波动幅度小于 0.6%。Si—Sn, Si—F 和 Sn—F 的平均配位数分别为 3, 1 和 1, 并且 Si—Sn, Si—F 和 Sn—F 的平均键长分别为 2.80 Å, 1.65 Å 和 1.96 Å。这些结果表明二维的 SiSnF<sub>2</sub> 在室温( $T = 300$  K)下是热稳定的。

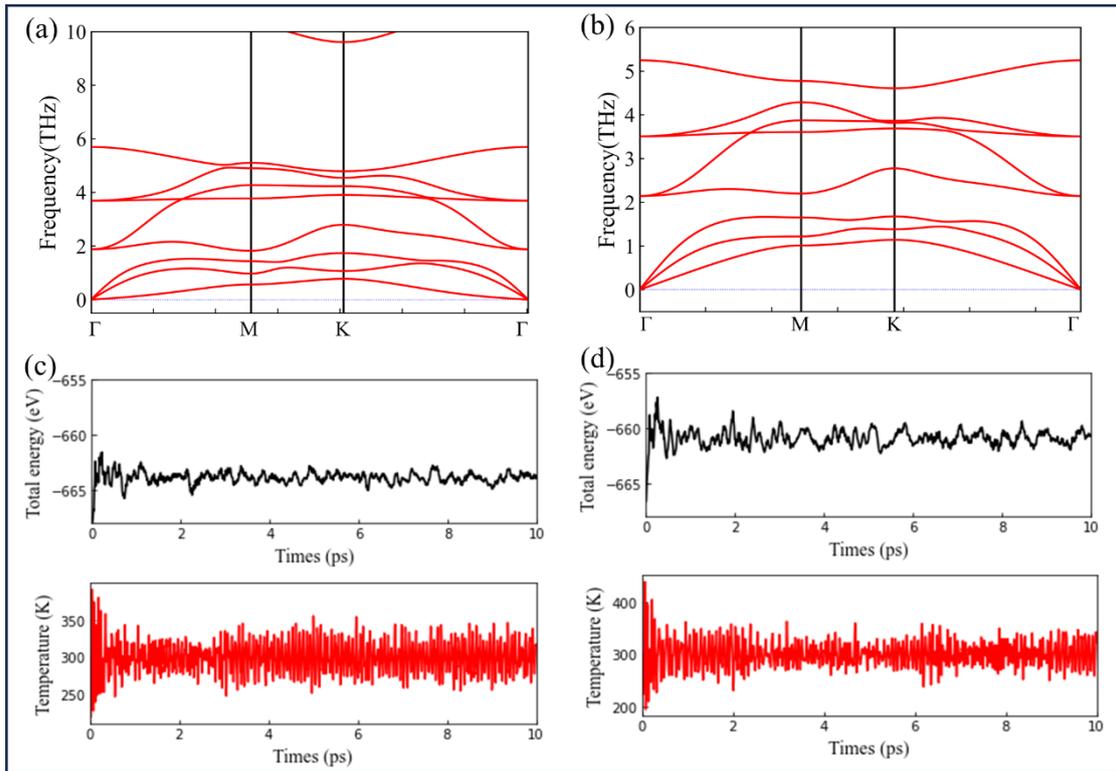


图 S1 (a), (b) 分别是施加应变 0% 和 5% 应变的体系的声子谱; (c), (d) 分别是施加应变 0% 和 5% 应变的体系在 300 K 的第一性原理分子动力学结果, 其中顶部和底部分别对应总能和温度随时间的变化。

Fig. S1. (a), (b) Phonon spectra of the system under 0% and 5% strain, respectively; (c), (d) the first-principles molecular dynamics results of the system at 300 K under 0% and 5% strain, respectively. The top and bottom parts correspond to the total energy and temperature changes over time, respectively.

综合上述结果, 应变前后( $\varepsilon = 0\%$ 和  $\varepsilon = 5\%$ )的晶体结构都具有动力学、热学和机械稳定性。

#### 参考文献

- [S1] Togo A, Oba F, Tanaka I 2008 *Phy. Rev. B* **78** 134106
- [S2] Togo A, Tanaka I 2015 *Scripta Mater.* **108** 1
- [S3] Wang V, Xu N, Liu J C, et al. 2021 *Comput. Phys. Commun.* **267** 108033
- [S4] Wang V, Tang G, Liu Y C, et al. 2022 *J. Phys. Chem. Lett.* **13** 11581