

碳硅二炔结构及性质分子动力学模拟研究*

颜笑 辛子华[†] 张娇娇

(上海大学物理系, 上海 200444)

(2013年7月26日收到; 2013年9月1日收到修改稿)

采用基于量子力学的半经验哈密顿量的计算方法, 即 SCED-LCAO 方法, 模拟研究了碳硅二炔的稳定性结构、成键特点、电子结构等性质. 得出其最稳定的结构是单层平面结构, 晶格常数为 12.251 Å. 它通过含有两个 Si-C 三键的链连接六元环构成. 这种平面结构在很大高温范围内都可以保持其稳定特性, 直到 1520 K 时, 该基本结构才被破坏, 且结构中出现四元环. 体系温度低于 1520 K 时, 均可通过降温, 恢复其零温时的结构. 研究还发现这种共轭结构中 Si, C 原子间存在稳定的 sp 杂化形式, 对分布函数得出其键长为 1.58 Å 左右. 高温时 sp 杂化逐渐转变成其他杂化形式. 计算结果表明, 在零温下, 该电中性系统中存在离域 π 键, 使得系统中的 Si-C 键长呈现平均化趋势. 研究表明, 碳硅二炔的能隙为 1.416 eV, LUMO, HOMO 能级分别是 0.386 eV 和 -1.03 eV 表明了其 n 型半导体特性.

关键词: 碳硅二炔, 分子动力学模拟, sp 杂化, 稳定性

PACS: 81.05.Zx, 61.50.Ah, 73.22.-f, 87.10.Tf

DOI: 10.7498/aps.62.238101

1 引言

近年来, 伴随着石墨烯进入研究热潮, 其他二维碳材料也成为人们关注的热点. 石墨炔就是其中最引人注目的一种^[1-4]. 研究证明, 单层石墨炔是第一个以 sp 和 sp² 杂化态同时存在而形成的一种二维碳同素异形体. 它是由碳碳三键将碳六元环共轭连接形成二维平面网络结构的全碳分子, 并且被认为可能是人工合成的、非天然的碳同素异形体中最稳定的一种^[5], 具有丰富的碳化学键、大的共轭体系、宽面间距, 同时也具有优良的化学稳定性和半导体性能. 石墨炔特殊的电子结构使其在电子、能源以及光电等领域都具有潜在、重要的应用前景^[6-9].

Li 等^[6] 利用六炔基苯在铜片的催化作用下发生偶联反应, 通过化学方法成功地在铜片表面上合成了大面积的碳的新同素异形体——石墨二炔 (graphdiyne) 薄膜. 该工作对石墨二炔 (graphdiyne) 的制备研究表明: 石墨二炔单晶薄膜具有较高的有序度和较低的缺陷, 其几何结构如图 1 所示, 薄膜

电导率为 2.516×10^{-4} S/m. SEM, TEM 研究发现这种薄膜在铜片表面大面积连续地生长并且具有很好的柔韧性. Malo 小组^[10] 通过计算机模拟发现, 石墨炔或许拥有比石墨烯更好的导电性能. Jiao 等^[11] 理论上计算了 H₂, CH₄ 在石墨炔表面的吸附情况, 计算结果表明气体分子在石墨炔中心处的吸附能最大. Zheng 等^[12] 通过第一性原理研究了多层石墨炔的性质与电子结构, 计算结果表明多层石墨炔具有稳定结构, 并且反应出多层石墨炔的禁带宽度和电场强度之间的关系. 于此同时, 人们对石墨炔带的电子结构也做了详细的研究^[13].

对各种石墨炔的二维衍生物的研究也是当今重要的研究内容. 一方面研究者积极设计各种可能二维碳的衍生物^[10], 另一方面研究预测了石墨炔衍生物的一系列电学、磁学、超导、力学等方面的性质. Enyashin 等^[14] 计算了 F 掺杂的石墨炔结构的稳定性与电子结构, 发现其性质与碳氟元素的化学计量比有很大关联. Özçelik 等^[15] 预测了一种二维的 BN, 其结构与石墨炔类似, 并且模拟了其加热过程和氢化过程, 探究了其电子结构和磁学性质. Pei 等^[16] 设计了一种具有类似石墨炔结构的硅纳

* 国家自然科学基金 (批准号: 61176118) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: zhxin@shu.edu.cn

米带,研究了其电子结构与成键特点.

另外, SiC 作为一种新型半导体材料,以其优异的高热导率、高耐磨性和耐腐蚀性,在航空、航天、汽车、机械、电子、化工等工业领域得到广泛的应用,因此对一维和二维的 SiC 结构的研究也吸引了很多研究者的关注. Sun 小组^[17]对 SiC 的纳米线和纳米管进行了深入的研究. Zou 等^[18]利用第一性原理研究 β -碳化硅/碳纳米管核壳结构的电子结构特性. Yu 小组^[19]对二维的石墨化的 SiC 进行了模拟计算,发现二维的 SiC 可以稳定存在,证明了 Si-C 之间可以形成有效的 sp^2 杂化. Li 等^[20]基于密度泛函理论研究了 Si_mC_n 团簇的结构与性质. Tang 等^[21]对温度变化条件下的石墨烯/6H-SiC 复合结构分析了结构特点与稳定性. 这些以往的相关研究工作表明, Si-C 之间既可以形成 sp^3 也可形成 sp^2 杂化,另外,对于二维碳硅化合物在温度变化时的动力学过程研究还比较少,对碳硅炔的研究也未见报道.

本文即设计了一种新型的碳硅二炔,同时对它的稳定性进行了研究. 着重研究了这种大型共轭系统的成键特点以及电子结构;并且模拟了温度变化时,这种化合物的动力学过程;讨论了其杂化方式的变化,发现这种共轭系统中 Si-C 可以 sp 杂化态成键.

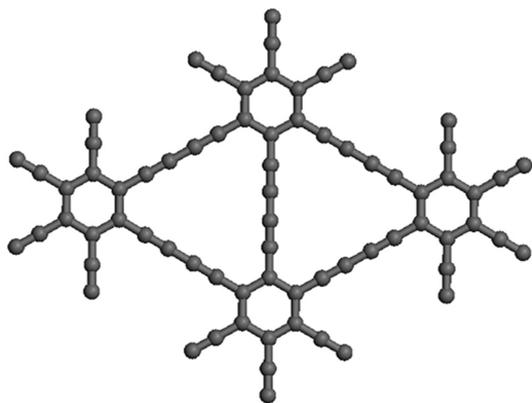


图1 石墨二炔的几何结构图

2 理论方法

本工作将利用一种基于量子力学的半经验哈密顿量的计算方法,这种计算方法是由路易斯维尔大学凝聚态理论研究组提出的,简称为 SCED-LCAO 方法,该方法是在原子轨道线性组合理论(LCAO)的框架上发展的. 它考虑了环境(ED)作用和电荷重新分布的自洽性^[22,23]. 考虑了参数方

程组描述了电子-电子相互作用和电子-离子相互作用. 计算的总能量包括能带能量,电子的重复计数修正项及离子离子间的排斥作用. 此方法将通过求解一个广义的本征值方程来获得能带结构能量,并且每个原子受力情况由 Hellmann-Feynman 定理求出^[24,25]. SCED-LCAO 方法最突出的特点就是它可以对那些在第一性原理计算范围之外的大型复杂系统进行结构优化. 关于第一性原理和 SCED-LCAO 方法的效率对比可文献^[23]. 人们已经用 SCED-LCAO 分子动力学方法研究过硅基系统^[22]、大型的富勒烯^[26]、以及一些碳化硅的纳米结构^[27,28]. 文献^[22, 23]中已经详细描述了 SCED-LCAO 方法并且在文献^[27, 28]的参考文献和附录中对于这种方法有一个简短的概述.

SCED-LCAO 方法建立起来的哈密顿量,其中的每一项的物理意义都非常清晰,因此方便于做体系的性质分析. SCED-LCAO 处理的体系,不管体系最终形成离子键,共价键或是金属键,参数都是固定的,因而能够方便地研究体系的性质和功能.

我们利用路易斯维尔大学凝聚态研究小组提供的 SCED-LCAO 源代码对碳硅二炔的稳定性以及晶面结构进行了模拟计算:调整晶格常数的大小对碳硅二炔进行了平面和曲面情况下模拟研究,找到了最稳定的结构;讨论其禁带宽度,结合能以及杂化方式;模拟温度变化时碳硅二炔的动力学过程.

3 模拟结果与讨论

本部分我们研究一种新型碳硅炔,该化合物结构上可以看成掺杂硅原子的石墨二炔,故命名为碳硅二炔. 掺杂后 $N(C):N(Si)=1:1$,几何结构如图2所示,黄色原子代表硅原子,灰色原子代表碳原子. 碳硅二炔是由碳原子与硅原子组成的类似石墨的六元环经碳硅链连接而成,硅原子和碳原子交替排列. 那么这种结构可否以平面形式稳定存在呢? 性质如何? 我们将用 SCED-LCAO 方法对其进行模拟研究.

3.1 碳硅二炔基态模拟研究

让晶格常数 a 在 11.935 到 12.565 Å 之间变化,对图2所示的周期结构在零温下做弛豫,初始结构取为平面. 模拟计算得到的平均原子能量 E 在图4中实线绘出 $a = 12.251$ Å 时为能量最低点.

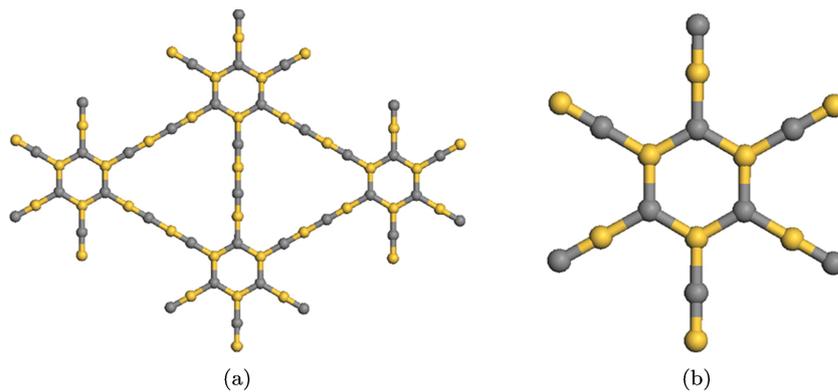


图2 碳硅二炔结构图 (a) 几何结构图; (b) 结构单元

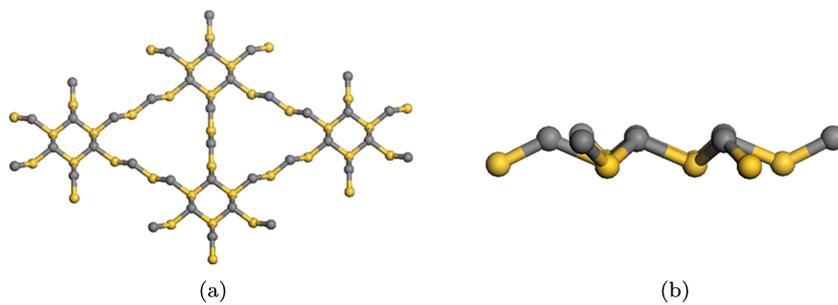


图3 碳硅二炔的假定曲面结构图 (a) 俯视图; (b) 侧视图

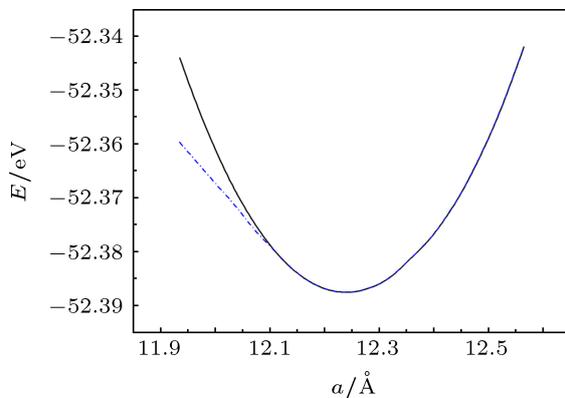


图4 零温模拟后平均原子能量图线

随后, 我们调整上面弛豫得到的平面结构, 使各晶格常数下的结构变为弯曲晶面, 且硅原子和碳原子呈现锯齿形弯曲, 如图3所示. 弯曲的高度分别取 0.01 \AA 和 0.8 \AA . 再次进行分子动力学模拟得到的平均原子能量 E 在图4中的虚线画出. 模拟表明, 这两种弯曲高度下的初始结构经模拟后, 都弛豫成相同的结构; 当晶格常数 a 大于 12.09 \AA 时, 两种初始曲面弛豫后都变成成平面结构, 并且弛豫后结构与从平面结构出发模拟的结果结构相同; 当晶格常数 a 小于 12.09 \AA 时, 两种初始曲面无法弛豫成平面结构. 但是, 图4表明能量最低点 $a = 12.251 \text{ \AA}$ 时, 两条曲线的点是重合的, 这说明碳硅二炔最稳定的

结构是平面结构.

3.2 基态结构的局域分析

上面研究表明碳硅二炔稳定平面结构的晶格常数为 $a = 12.251 \text{ \AA}$, 我们对该结构的特点进行了分析, 得到以下结果: Si-C 键长在 1.581 \AA 到 1.852 \AA 之间. 如图6所示, 为准确描述其结构的特点, 我们把不同位置的碳原子和硅原子分别用 C(1), C(2), C(3) 和硅原子 Si(1), Si(2), Si(3) 标出. 结构特点在表1中给出, 从表1可看出: 由于 Si(1)-C(3), Si(1)-C(1) 的键长不等, C(3)-Si(1)-C(1) 的键角为 120.3° , C(3)-Si(1)-C(3) 之间的键角是 119.4° , 所以 Si(1), C(3), C(1) 之间的杂化不是严格的 sp^2 杂化, 但是非常接近 sp^2 杂化; 表1中各原子电荷量说明 C(3) 所带电荷量比 C(1) 多, 表明 C(3) 吸引电子的能力更强. 所以 Si(1)-C(3) 之间的电荷量之差比 Si(1)-C(1) 之间的电荷量之差大. 另外, Si(1)-C(3)-Si(1) 的键角为 120.6° , Si(3)-C(3)-Si(1) 之间的键角是 119.7° , 所以 Si(3), C(3), Si(1) 之间的杂化也应该非常接近 sp^2 杂化. 分析原子所带电荷量得出 Si(1) 失去电子的能力比 Si(3) 强, 那么 Si(1)-C(3) 之间的电荷量之差比 Si(3)-C(3) 之间的电荷量之差大. 对于 sp^2 杂化构成的共价键, 当电荷量之差越大

时, Si-C 共价键上的共用电子对相互靠近, 键长就越小. Si(2)-C(1), Si(3)-C(2) 之间的键长在 1.58 Å 左右, 表明这是 Si-C 三键, 键角均为 180°, 表明两者的杂化形式应该是 sp 杂化. 所以碳硅二炔中的六

元环是通过含有两个碳硅三键的链连接而成的. 对于碳硅二炔这样的电中性系统来说, 由于离域 π 键的存在, 使得系统中的 Si-C 键长呈现平均化趋势.

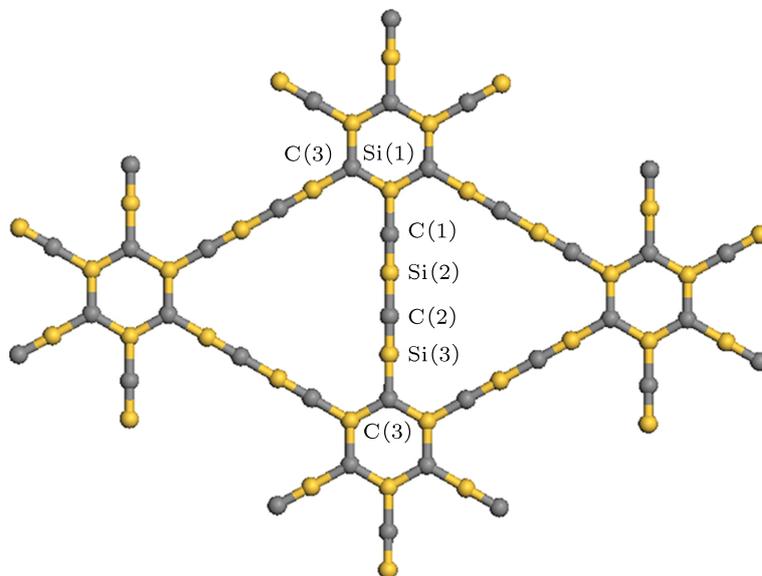


图5 碳硅二炔几何结构图

表1 碳硅二炔的键长以及原子所带电荷量

	键长/Å	硅原子所带电荷量/e	碳原子所带电荷量/e	电荷量之差/e
Si(1)-C(1)	1.829	3.6192	4.3545	0.7353
Si(1)-C(3)	1.818	3.6192	4.3707	0.7515
Si(3)-C(3)	1.852	3.6549	4.3707	0.7158
Si(2)-C(1)	1.585	3.6428	4.3545	0.7117
Si(2)-C(2)	1.782	3.6428	4.3577	0.7149
Si(3)-C(2)	1.581	3.6549	4.3577	0.7028

表2 石墨二炔和碳硅二炔的禁带宽度、结合能以及键长

研究对象	禁带宽度/eV	结合能/eV	键长/Å
石墨二炔	0.97	-8.12788	1.455 1.274 1.398
碳硅二炔	1.416	-6.62852	1.581 1.585 1.782 1.818 1.829 1.852

表2 给出了零温下石墨二炔和碳硅二炔的禁带宽度、结合能以及键长的情况. 根据计算得出碳硅二炔这种化合物的 LUMO 能级为 0.386 eV, HOMO 能级 -1.03 eV, 由此可见, 碳硅二炔应该是一种 n 型半导体材料. 其最稳定的结构是单层平面结构, 其晶格常数是 12.251 Å.

3.3 温度变化时碳硅二炔动力学过程模拟

为研究前面得到的平面结构的稳定性, 及升温

时的动力学过程, 我们对得到的平面结构进行了加温模拟研究. 模拟结果在图6中给出. 我们先将碳硅二炔由 0 K 加温至 400 K, 发现碳硅六元环形状保持良好, 碳硅链状结构有轻微弯曲. 再由 400 K 加温至 800 K, 发现其晶格结构中碳硅六元环可以维持基本形状, 但是碳硅直线链状结构已经变成曲线形结构, 晶格也出现了较小的扭曲. 随后我们将 800 K 弛豫后的结果加温至 1200 K, 碳硅二炔仍然保持了平面结构, 但是晶格形状与 800 K 时的结构相比出现了一些畸变, 碳硅直线链状结构弯曲的程度更大一些. 然后我们将 1200 K 弛豫的结果加温至 1600 K, 此时碳硅二炔的晶格形状与 1200 K 时的结构相比出现了更大的畸变, 并且两条不同的碳硅链状结构之间出了数个四元环. 从形成四元环的位置来看, 往往四元环位于六元环附近, 这是

由于在六元环附近, 两条相邻的碳硅链距离非常近, 在高温环境中, 碳硅原子的热运动非常剧烈, 一旦硅原子和碳原子运动到比较近的位置后, 便形成键能较大的共价键, 此时往往就有多个四元环出现. 而且原有结构已经完全被破坏, 在每个六元

环附近有多个四元环. 另外, 值得指出的是, 400 K, 800 K, 1200 K 温度时虽然晶格结构略有畸变, 但仍然保持很好的平面特性; 直到温度达到 1630 K 时其平面特性稍有破坏, Z 方向格点最大高度差为 0.001 Å.

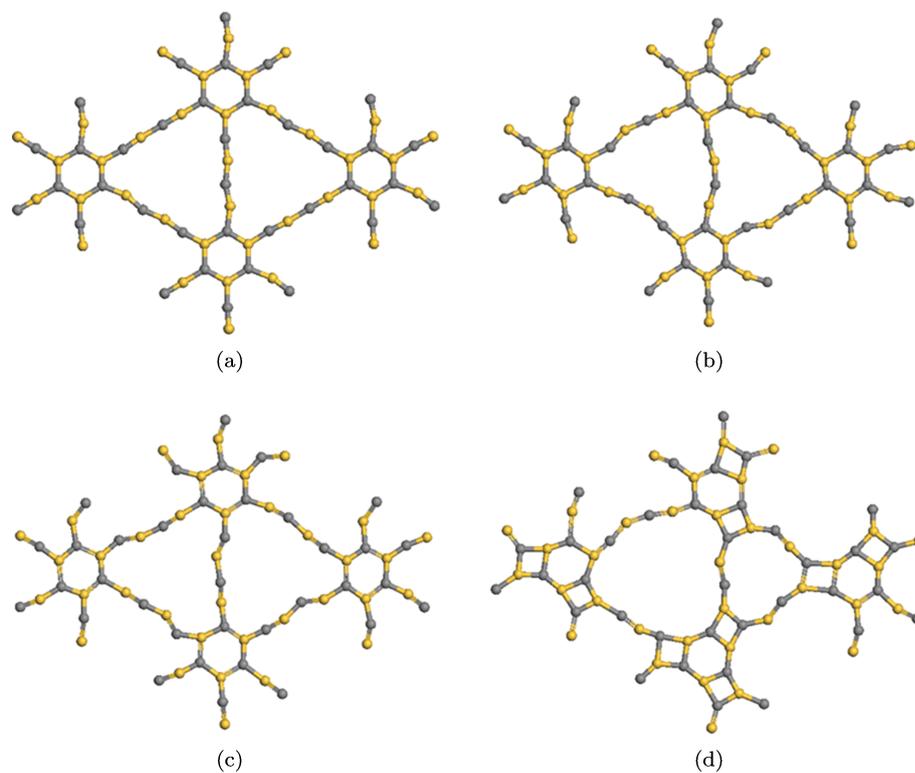


图6 碳硅二炔在不同温度下的弛豫后结构图 (a) 400 K 温度时的结构; (b) 800 K 温度时的结构; (c) 1200 K 温度时的结构; (d) 1600 K 温度时的结构

从上面的结果来看, 系统温度越高, 碳硅原子做热运动偏离其平衡位置的距离就越大, 越容易引发晶格的畸变.

随后我们分别将加温至 400 K, 800 K, 1200 K, 1600 K 的碳硅二炔降温至 0 K, 降温弛豫的结果表明, 前三种情形下碳硅二炔都可以弛豫回升温前的平面结构. 当碳硅二炔由 1600 K 降温至 0 K 时, 在晶格中仍然有多个四元环存在, 并不能弛豫回升温前的平面结构. 其结构如图 7 所示, 这说明在降温过程中, 四元环在这种系统中比较稳定, 不易断裂.

更细致的研究表明, 维持碳硅二炔基本结构的最高温度为 1520 K, 当温度低于此温度时, 系统均能通过降温恢复成升温前的稳定结构. 当温度高于此温度时, 系统将出现四元环, 即使通过降温, 也无法恢复到初始结构. 这表明 1520 K 时, 系统结构发生了相变.

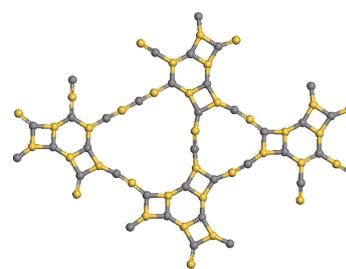


图7 碳硅二炔从 1600K 降温至 0K 的结构图

3.4 温度变化时稳定结构的局域分析

我们分别对 0 K, 400 K, 800 K, 1200 K, 1600 K 温度下弛豫的结构特征进行了局域分析, 得到的对分布函数 $g(r)$ 如图 8 所示, 从图中可以得出 0 K 下弛豫的结构中键长明显有 2 个峰值, 分别位于 1.58 Å 和 1.82 Å 附近. 随着温度的升高, 键长分布的峰值越来越复杂, 这说明温度越高, 热运动越剧烈, 那么系统中的共价键键长的分布就越杂乱. 从

400 K 的曲线来看, 峰值位于 1.60 Å 和 1.82 Å 附近, 说明此时结构经历加温过程后的变化很小. 当温度处于 800 K 的情况下, 键长分布集中在 1.57 Å 到 1.90 Å 之间, 说明此时由于原子的热运动, 直线链状结构有较大变化, 使得原本 1.60 Å 和 1.82 Å 左右的碳硅键长度出现平均化. 当继续加温至 1200 K 时, 峰值分布的范围与前面的情况相比更宽了. 最后, 在 1600 K 的温度下, 1.60 Å 左右的这个峰值消失了, 但是 1.80 Å 处的峰值仍然存在. 这说明在高温环境下, Si-C 的 sp 杂化非常不稳定, 逐渐转化成了其他杂化类型, 此时系统中 sp^2 杂化占有较大比例.

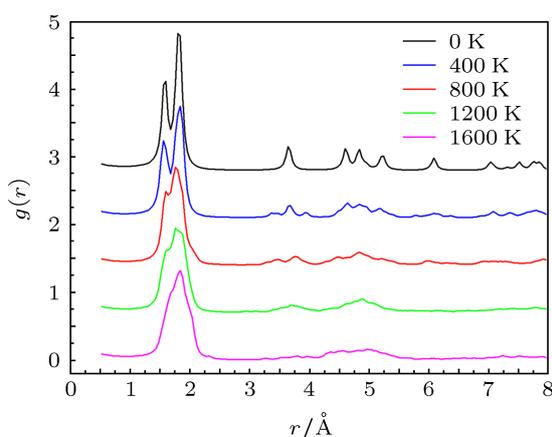


图 8 碳硅二炔的分别在 0, 400, 800, 1200, 1600 K 时的对分布函数 $g(r)$ 曲线

随后我们对 0 K, 400 K, 800 K, 1200 K, 1600 K 温度下弛豫的结构做了键角分析, 键角分布函数 $\theta(r)$ 如图 9 所示, 从图中可以得出 0 K 下弛豫的结构中键角有 2 个峰值, 分别位于 120° 附近和 180°, 这就说明 0 K 状态下系统中主要的杂化方式是 sp 和近 sp^2 杂化. 随着温度的上升, 原子热运动加剧, 碳硅六元环和碳硅链状结构出现了畸变, 键长的峰值出现了一系列变化, 在 400 K, 800 K 的情况下峰值主要集中在 110° 到 130° 之间以及 160° 到 180° 之间, 这说明这些峰值的变化就是由六元环的形状的变化以及碳硅链状结构的弯曲造成的. 在 1200 K 的情况下, 峰值主要分布在 95° 到 125° 之间以及有一些小峰值分布在 160° 到 180° 之间, 这就说明已经在六元环的附近有出现四元环的趋势, 四元环中

含有部分 80° 到 120° 之间的键角. 在 1600 K 的情况下, 峰值主要出现在 80° 和 100° 的位置, 以及在 110° 和 150° 之间出现了少量均匀的杂峰, 这说明此时的结构中六元环附近有比较多的四元环, 并且六元环结构受到很大的破坏, 此时的结构中原子之间的键角分布杂乱并且平均化.

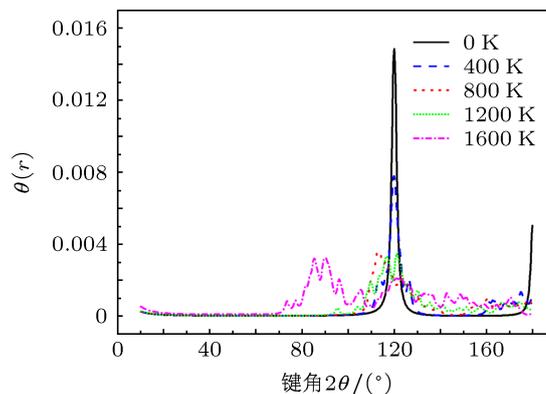


图 9 碳硅二炔分别在 0, 400, 800, 1200, 1600 K 时的键角分布函数曲线

4 结论

本文通过对碳硅二炔的模拟研究发现, 碳硅二炔最稳定的结构是单层平面结构, 晶格常数为 12.251 Å. 系统在 1520 K 附近发生结构相变. 当温度高于 1520 K 时, 其基本结构将被破坏, 即使通过降温, 也无法恢复其原有结构. 该平面结构是通过含有两个 Si-C 三键的链连接六元环形成的, 并且 Si, C 原子间出现了稳定的 sp 杂化形式, 从对分布函数中可以发现其键长为 1.58 Å 左右. C, Si 原子间的 sp 杂化不甚稳定, 加温过程中 sp 杂化逐渐转变成其他杂化形式. 在零温下, 对于碳硅二炔这样的电中性系统来说, 由于离域 π 键的存在, 使得系统中的 Si-C 键长呈现平均化趋势. 研究表明, 碳硅二炔的 LUMO, HOMO 能级分别为 0.386 eV 和 -1.03 eV, 说明它是一种 n 型半导体材料.

本工作是在美国路易斯维尔大学凝聚态理论组提供的 SCED-LCAO 程序下完成的, 就本工作还做了许多有意义的讨论, 在此特对该组成员致谢.

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A 2004 *Science* **306** 666
 [2] Zhang Y, Tan Y W, Stormer H L, Kim P 2005 *Nature* **438** 201
 [3] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S, Geim A K

- 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
 [4] Hirsch A 2010 *Nat. Mater.* **9** 868
 [5] Haley M M 2008 *Pure Appl. Chem.* **80** 519
 [6] Li G X, Li Y L, Liu H B 2010 *Chem. Commun.* **46** 3256

- [7] Du H L, Deng Z B, Lü Z Y 2011 *Synth. Met.* **161** 2055
- [8] Li G X, Li Y L, Qian X M 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 2611
- [9] Long M Q, Tang L, Wang D, Li Y, Shuai Z G 2011 *ACS Nano* **5** 2593
- [10] Malko D, Neiss C 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 086804
- [11] Jiao Y, Du A J, Hankel M, Rudolph V 2011 *Chem. Commun.* **47** 11843
- [12] Zheng Q, Luo G, Liu Q H 2012 *Nanoscale* **4** 3990
- [13] Pan L D, Zhang L Z, Song B Q, Du S X, Gao H J 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 173102
- [14] Enyashin A N, Ivanovskii A N 2013 *Superlattices and Microstructures* **55** 75
- [15] Ongun Özçelik V, Ciraci S 2013 arXiv:1301.2593v2 [Cond-mat.mtrl-sci]
- [16] Pei Y, Wu H B 2013 *Chin. Phys. B* **22** 057303
- [17] Sun X H, Li C P, Wong W K 2002 *J. Am. Chem. Soc.* **124** 14464
- [18] Zou X C, Wu M S, Liu G, Ouyang C Y, Xu B 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 107101 (in Chinese) [邹小翠, 吴木生, 刘刚, 欧阳楚英, 徐波 2013 物理学报 **62** 107101]
- [19] Yu M, Jayanthi C S, Wu S Y 2010 *Phys. Rev. B* **82** 075407
- [20] Li B, Yang C L, Qi K T, Zhang Y, Sheng Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3104 (in Chinese) [李兵, 杨传路, 齐凯天, 张岩, 盛勇 2009 物理学报 **58** 3104]
- [21] Tang C, Wei X L, Tan X, Peng X Y, Sun L Z, Zhong J X 2012 *Chin. Phys. B* **21** 066803
- [22] Leahy C, Yu M, Jayanthi C S, Wu S Y 2006 *Phys. Rev. B* **74** 155408
- [23] Yu M, Wu S Y, Jayanthi C S 2009 *Physica E* **42** 1
- [24] Hellmann H 1937 *Einführung in die Quantenchemie* (Leipzig and Vienna: Franz Deuticke) pp 285–286
- [25] Feynman R P 1939 *Phys. Rev.* **56** 340
- [26] Yu M, Chaudhuri I, Leahy C, Wu S Y, Jayanthi C S 2009 *J. Chem. Phys.* **130** 184708
- [27] Yu M, Jayanthi C S, Wu S Y 2013 *J. Mater. Res.* **28** 57
- [28] Yu M, Jayanthi C S, Wu S Y 2012 *Nanotechnology* **23** 235705

Molecular dynamics study on the structure and properties of silicon-graphdiyne*

Yan Xiao Xin Zi-Hua[†] Zhang Jiao-Jiao

(Department of Physics, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

(Received 26 July 2013; revised manuscript received 1 September 2013)

Abstract

A study to shed light on the existence of silicon-graphdiyne as well as their stability, structural and other properties, has been carried out using an efficient semi-empirical Hamiltonian scheme based on quantum mechanics. Its most stable structure is a single planar structure with a lattice constant of 12.251 Å. The system occurs structural phase transition at 1520 K. When the temperature is above 1520 K, the basic structure will be destroyed, While the temperature is below 1520 K, the system can restore its initial structure. It is found that sp hybridization exists between Si and C atoms in this conjugated structure. The study of pair distribution function shows that sp bond length is about 1.58 Å. The sp hybridization would gradually transform into other forms of hybridization at high temperatures. Our calculation indicates that delocalized π -bonds exist in this system and all the lengths of Si-C bonds tend to be more uniform. The energy gap is 1.416 eV. LUMO and HOMO energy levels are 0.386 eV and -1.03 eV respectively. It is found that the silicon-graphdiyne should be n-type material.

Keywords: silicon-graphdiyne, molecular dynamics simulation, sp hybridization, stability

PACS: 81.05.Zx, 61.50.Ah, 73.22.-f, 87.10.Tf

DOI: 10.7498/aps.62.238101

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61176118).

[†] Corresponding author. E-mail: zhxin@shu.edu.cn