

## 硅醚/石墨醚异质结构光电性质的理论研究

张颖 刘春生

## Theoretical study of optical and electronic properties of silicether/graphether heterostructure

Zhang Ying Liu Chun-Sheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 123102 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20202193

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202193>

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

高温高压下立方氮化硼和六方氮化硼的结构、力学、热力学、电学以及光学性质的第一性原理研究

First-principles study of structural, elastic, thermodynamic, electronic and optical properties of cubic boron nitride and hexagonal boron nitride at high temperature and high pressure

物理学报. 2019, 68(7): 077102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182030>

不同价态Mn掺杂InN电子结构、磁学和光学性质的第一性原理研究

First-principle study on electronic structures, magnetic, and optical properties of different valence Mn ions doped InN

物理学报. 2018, 67(8): 087501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172504>

$\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$  ( $x = 0.25, 0.50, 0.75$ ) 磁学和光学性质的第一性原理研究

First-principles calculations of magnetic and optical properties of  $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$  ( $x = 0.25, 0.50, 0.75$ )

物理学报. 2019, 68(17): 176301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182305>

$\text{Ti}_3\text{O}_5$  弹性、电子和光学性质的第一性原理研究

First-principles investigation on elastic, electronic, and optical properties of  $\text{Ti}_3\text{O}_5$

物理学报. 2019, 68(20): 207301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190664>

Fe, Co, Ni掺杂GaSb的电子结构和光学性质

Electronic structures and optical properties of Fe, Co, and Ni doped GaSb

物理学报. 2019, 68(18): 184202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190290>

第一性原理方法研究N-Pr共掺杂ZnO的电子结构和光学性质

Electronic and optical properties of n-pr co-doped anatase  $\text{TiO}_2$  from first-principles

物理学报. 2019, 68(1): 017401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181531>

## 硅醚/石墨醚异质结构光电性质的理论研究\*

张颖 刘春生†

(南京邮电大学电子与光学工程学院, 南京 210023)

(2020 年 12 月 22 日收到; 2021 年 2 月 6 日收到修改稿)

继石墨烯被发现合成之后, 二维石墨醚及硅醚材料被预测为新型半导体. 基于密度泛函理论的第一性原理计算, 对硅醚/石墨醚异质结构的电子和光学性质进行了系统的研究. 结果表明: 当层间距为 2.21 Å 时, 石墨醚的凹氧原子位于硅醚的凹氧原子之上的堆砌方式是最稳定的. 此外, 它的间接带隙为 0.63 eV, 小于石墨醚和硅醚的带隙. 通过调节应变和电场强度, 可以调整硅醚/石墨醚异质结构的带隙. 特别是在压缩应变下, 异质结构存在间接带隙向直接带隙的转变. 硅醚/石墨醚异质结构的吸收系数在紫外光区出现强峰, 与单层石墨醚和硅醚相比, 异质结构的光吸收能力在 80—170 nm 范围内明显增强, 结果表明硅醚/石墨醚异质结构具有突出的紫外吸收能力. 本工作可为纳米器件提供一种具有潜在应用前景的新型材料.

**关键词:** 第一性原理, 硅醚/石墨醚异质结构, 电子性质, 光学性质

**PACS:** 31.15.E-, 61.46.-w, 73.22.-f, 78.20.Ci

**DOI:** 10.7498/aps.70.20202193

## 1 引言

自从 Novoselov 和 Geim 在 2004 年首次制备和分离出单层石墨烯<sup>[1]</sup>, 具有独特物理性质的二维材料一直是纳米科学和纳米技术领域的研究热点之一<sup>[2,3]</sup>. 由于其优异的电子、力学和光学性能, 二维材料在过去的几年中引起了人们的关注, 并得到广泛的应用<sup>[1,3–6]</sup>. 此外, 二维材料在能量转换和存储<sup>[7–9]</sup>、电磁响应材料和器件等方面也具有良好的应用前景<sup>[10–12]</sup>. 如石墨烯<sup>[13,14]</sup>, Mxene<sup>[15,16]</sup>, 过渡金属硫族化合物<sup>[17,18]</sup>, 黑磷烯<sup>[19]</sup>和  $g\text{-C}_3\text{N}_4$ <sup>[20]</sup>等二维材料具有特殊的电磁性能和吸收屏蔽性能, 它们在微波吸收、电磁干扰屏蔽、信息安全、电磁防护和电磁波成像等领域有着巨大的发展潜力<sup>[21,22]</sup>.

在对单一的二维材料进行深入研究的同时, 另一个研究领域也同时出现, 即由不同二维材料耦合而形成的异质结构. 迄今为止, 已有许多实验和理

论方法来研究二维异质结构的优点, 如石墨烯/氮化硼<sup>[23–25]</sup>、砷烯/锑烯<sup>[26]</sup>、砷烯/石墨烯<sup>[27]</sup>. 这些研究表明, 异质结构具有优异的光学和电子性能, 被认为是极有前景的新型微电子器件. 例如, Chen 等<sup>[28]</sup>研究了硅锗 (SiGe) 和氮化硼 (BN) 结合形成的异质结构, 结果表明异质结构的带隙相对于单层 SiGe 扩大到约 57 meV. 此外, 与两个单分子层相比, 异质结构的光学性质得到提高, 并主要增强其在紫外光区的光学性质. 因此, 更有利于异质结构在微电子和光电子领域的应用.

如今, 异质结构如石墨烯/过渡金属硫族化合物<sup>[29–31]</sup>、锑烯/锗烯<sup>[32]</sup>、硫化镓/硒化镓<sup>[33]</sup>、石墨烯/砷化镓<sup>[34]</sup>、氮化硼/硅烯<sup>[35]</sup>、硅锗/氮化硼<sup>[28]</sup>以及磷烯/氮化硼<sup>[31]</sup>等已受到广泛关注. 它们结合形成的异质结构与单个的二维材料相比具有优异的性能. 通过改变层间距、施加外加电场和应变, 可以有效地调节带隙. Wang 等<sup>[36]</sup>研究了锑烯/砷化镓异质结构的电子结构和光学性质, 发现在不同的界

\* 国家自然科学基金 (批准号: 61974068, 11704198) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: cslu@njupt.edu.cn

面相互作用下会发生直接带隙和间接带隙的改变,使异质结构更适合纳米器件的应用.此外,异质结构的形成可以产生较高的光吸收系数,因此锑烯/砷化镓异质结构在光电器件应用中可作为潜在的新材料. Cao 等<sup>[37]</sup>通过对锡/氧化锌异质结构施加外加电场和应变,结果表明电场可以调控电导率,提高电子传输性能.此外,当对异质结构施加压缩应变时,会发生由间接带隙向直接带隙的转变,当施加拉伸应变时,带隙会急剧减小.这种电子性质可调的异质结构将在纳米领域得到应用.

最近,二维石墨醚<sup>[38]</sup>和硅醚<sup>[39]</sup>被理论预测为具有优异的电子和光学性能的新型半导体材料.石墨醚具有各向异性的光学特性,并且在紫外区表现出强吸收.硅醚的吸收范围从紫外区到可见区.由于其优异的特性,使其在纳米电子和光电子领域具有广阔的应用前景.因为异质结构合成单个材料的属性,表现出独特的光学和电子性能.此外,异质结构的电子性质对应变和电场都很敏感,可以满足实际应用.所以将石墨醚和硅醚结合为具有期望的电子和光学性质的异质结构是可行的.

基于密度泛函理论的第一性原理计算方法被广泛应用于新型功能材料的预测及性能研究<sup>[28,40–42]</sup>.本文设计了一种新型的由硅醚和石墨醚组成的二维硅醚/石墨醚异质结构.通过第一性原理计算,从理论的角度系统地研究了其几何结构、电子性质和光学性质.结果表明,通过施加外加电场或应变可以调节带隙.重要的是,异质结构在压缩应变下会发生间接带隙向直接带隙的转变.此外,硅醚/石墨醚异质结构在紫外光区可以观察到高达  $1.7 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$  的光吸收峰,其高光吸收从紫外光区域扩展到可见光区域.因此,本文的研究结果对制备新型硅醚/石墨醚光电功能材料具有理论参考价值.

## 2 计算条件和方法

采用 CASTEP 程序包<sup>[43]</sup>进行了基于密度泛函的第一性原理计算<sup>[44,45]</sup>.电子交换关联势利用广义梯度近似中的 Perdew-Burke-Ernzerhof 交换关联形式<sup>[46]</sup>,模守恒赝势 (norm-conserving pseudopotential)<sup>[47]</sup>描述离子实和电子之间的相互作用.所有计算均采用了 Tkatchenko 和 Scheffler (DFT-TS)<sup>[48]</sup>方法来描述 van der Waals (vdWs) 相互作用.系统总能、原子间的相互作用力的收敛精度分

别为  $5 \times 10^{-7} \text{ eV/atom}$ ,  $0.005 \text{ eV/\AA}$ .采用 BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) 算法对结构进行几何优化,平面波函数截断能值取为  $1430 \text{ eV}$ ,在结构几何优化和计算电子性质时,布里渊区采用 Monkhorst-Pack 的  $k$  点取样的间距分别为  $0.02$  和  $0.01 \text{ \AA}^{-1}$ .为了避免相邻层之间的相互作用, $c$  方向真空层的厚度设为  $20 \text{ \AA}$ .

## 3 结果与讨论

### 3.1 结构与稳定性

优化后的石墨醚和硅醚的晶格常数分别为  $a = 3.61 \text{ \AA}$ ,  $b = 2.58 \text{ \AA}$  和  $a = 4.94 \text{ \AA}$ ,  $b = 3.80 \text{ \AA}$ ,与先前的研究一致<sup>[38,39]</sup>.为了减小石墨醚和硅醚之间的晶格失配,使用  $4 \times 3 \times 1$  的石墨醚超胞与  $3 \times 2 \times 1$  的硅醚超胞构建成硅醚/石墨醚异质结构.异质结构的晶格常数为  $a = 14.82 \text{ \AA}$ ,  $b = 7.62 \text{ \AA}$ .因此,硅醚的晶格参数保持不变,而石墨醚的晶格参数在扶手椅和之字形方向上表现出较小的晶格失配,分别约为  $2.5\%$  和  $1.5\%$ ,这对单层的电子性质影响不大.为了得到最稳定的匹配模型,在计算中考虑了 16 种可能的堆砌方式<sup>[49]</sup>.在方式 I 和 II 构型中,石墨醚凸起的氧原子分别位于硅醚凸起和凹陷的氧原子下方.在方式 III 和 IV 中,石墨醚凹陷的氧原子分别位于硅醚凸起和凹陷的氧原子下方.方式 V 和 VI 为石墨醚凹陷的氧原子分别位于硅醚凸起和凹陷的 Si 原子下方.方式 VII 和 VIII 为石墨醚凸起的氧原子分别位于硅醚凸起和凹陷的 Si 原子下方.方式 IX 至 XVI 可以看作为方式 I 至 VIII 中的石墨醚分别沿  $x$  轴旋转  $180^\circ$  的情况.

另外,为了评估硅醚/石墨醚异质结构的稳定性,可以将层间结合能 ( $E_b$ ) 定义为<sup>[33]</sup>

$$E_b = E_{\text{total}} - (E_{\text{graphether}} + E_{\text{silicether}}), \quad (1)$$

其中,  $E_{\text{total}}$  为硅醚/石墨醚异质结构的总能量;  $E_{\text{graphether}}$  与  $E_{\text{silicether}}$  分别为独立的石墨醚和硅醚的总能量.其他函数表示为  $E_b/S$ , 其中  $S$  为硅醚/石墨醚异质结构的耦合面积.根据  $E_b$  的定义,  $E_b$  的绝对值越大,说明这两个单层之间的界面在能量上更稳定,在实验中更容易获得<sup>[50]</sup>.图 1 为计算的异质结构的所有 16 种堆砌方式的结合能和层间距,计算结果表明,这些构型之间  $E_b$  的差异很小,说明堆砌方式对异质结构的总能量没有显著影响.尽管

如此, 为了研究方便, 选择能量最低的方式, 即方式 X (图 2) 作为本文的研究重点. 当层间距离为 2.21 Å 时, 异质结构的结合能 ( $-9.39 \text{ meV}/\text{\AA}^2$ ) 最低, 说明该堆砌模式下的结构最稳定. 而当层间距离大于 (小于) 该值时, 异质结构的结合能逐渐增大, 稳定性随着层间距离的增大 (减小) 而降低.

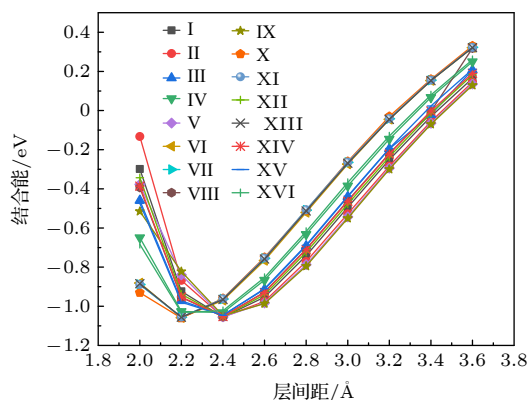


图 1 16 种堆砌方式在不同层间距下的结合能

Fig. 1. Binding energy of the sixteen stacking patterns under different interlayer distances.

### 3.2 电子结构

在确定了异质结构的构型和稳定性后, 计算了

硅醚/石墨醚的能带结构以了解其性质. 为了比较, 图 3(a) 和图 3(b) 分别显示了单个的石墨醚和硅醚的带隙. 从图 3(a) 和图 3(b) 可以看出, 计算得到的石墨醚是一种带隙为 0.85 eV 的直接带隙半导体, 导带底和价带顶位于  $\Gamma$  点. 而硅醚的间接带隙为 1.46 eV, 导带底和价带顶位于  $\Gamma$  和  $Y$  点之间. 图 3(c) 表明异质结构的间接带隙为 0.63 eV, 导带底位于  $\Gamma$  点, 而价带顶位于  $S$  和  $X$  点之间. 此外, 异质结构的带隙比石墨醚和硅醚的带隙要小.

计算了硅醚/石墨醚异质结构的总态密度 (TDOS) 和部分态密度 (PDOS), 如图 4 所示. 从图 4(a) 可以看出, 硅醚/石墨醚异质结构的导带和价带是由石墨醚和硅醚层贡献的, 在图 4(b) 和图 4(c) 的 PDOS 结果中存在轨道杂化. 对于导带最小值 (CBM), 能带由 C-2p, Si-3p 和 Si-3s 轨道态组成. 对于价带最大值 (VBM), 能带主要由 O-2p 和 Si-3p 轨道态贡献, Si-3s 和 C-2p 电子也较少分布在该区域.

机械应变的应用是调节材料的电子性能的有效方式, 从而可满足应用要求. 有许多研究报道, 可以通过应力和应变来改变材料的电子性质 [51–53]. 当使用硅醚/石墨醚异质结构作为纳米器件的组成

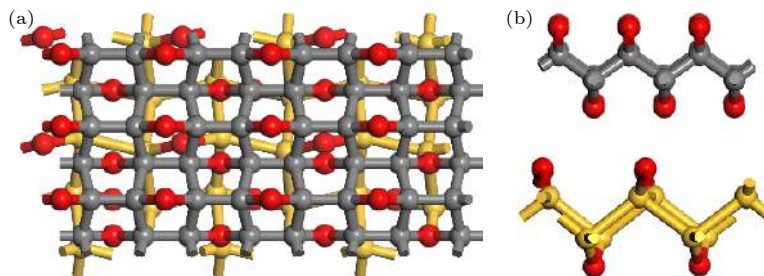


图 2 (a) 异质结构堆砌方式 X 的俯视图; (b) 堆砌方式 X 的侧视图; 红色、黄色和灰色的球分别代表氧原子、硅原子和碳原子  
Fig. 2. (a) Top view of stacking pattern X; (b) side view of the pattern X. O, Si and C atoms are presented by red, yellow and grey balls, respectively.

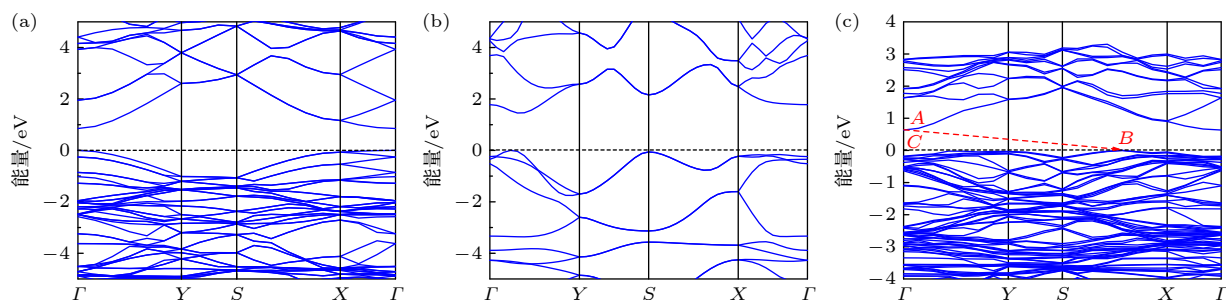


图 3 能带结构图 (a) 石墨醚; (b) 硅醚; (c) 硅醚/石墨醚异质结构, 其中点 A, B 和 C 分别为态 A, B 和 C 在能带结构中的位置  
Fig. 3. Band structure: (a) Graphether; (b) silicether; (c) silicether/graphether heterostructure. Points A, B and C in panel (c) are the positions of states A, B and C in the energy band structure respectively.



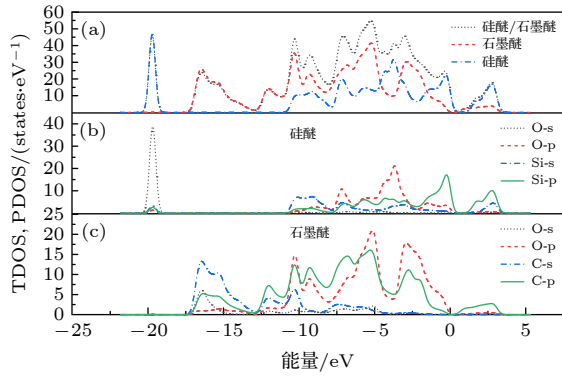


图4 硅醚/石墨醚异质结构的TDOS (a) 和PDOS (b), (c)  
Fig. 4. Total density (a) and partial density (b), (c) of the state of the graphether/silicether heterostructure.

部分时, 它可能会受到外加电场和应变的作用. 通过改变异质结构的晶格常数来施加均匀应力 [37,54]

$$\varepsilon = (a - a_0) / a_0, \quad (2)$$

其中  $a$  为应变条件下的晶格常数,  $a_0$  为本征晶格常数,  $\varepsilon$  的正值和负值分别表示对晶格常数的拉伸和压缩 [55]. 改变晶格常数会改变体系中原子间的距离, 从而会改变原子间的相互作用, 最终导致结

构的带隙发生变化. 如图 5(a) 所示, 在压缩应变下, 带隙值首先随着应变的增加而增加, 直到应变为 -6% 时, 带隙值增大为 1.02 eV, 总体来说, 在压缩应变下, 硅醚/石墨醚异质结构的带隙是增加的. 然而在拉伸应变下, 随着应变的增加, 带隙急剧减小. 从图 6 可以看出, 在压缩应变下, CBM 始终位于  $\Gamma$  点, 而 VBM 在 -2% 至 -4% 的应变范围保持在  $S-X$  路径, 并且在 -6% 至 -8% 的应变内转移到  $\Gamma$  点, 同时异质结构存在间接带隙到直接带隙的转变. 在拉伸应变下, CBM 也是始终位于  $\Gamma$  点, VBM 在 4%—8% 的应变范围内转移到  $X-\Gamma$  路径上, 带隙接近 0 eV.

双轴压缩应变可以引起间接带隙到直接带隙的跃迁, 所以探讨了这种间接带隙到直接带隙转变的本质. 当增加压缩应变时, CBM 一直位于  $\Gamma$  点, 而 VBM 位置发生改变. 当压缩应变为 -6%, VBM 转移到了  $\Gamma$  点. VBM 的迁移主要是由于在不同应变下两个价带边缘态之间的竞争所导致的, 如图 3(c) 中标记为态 B 和态 C, 从 PDOS 图可以看出它们

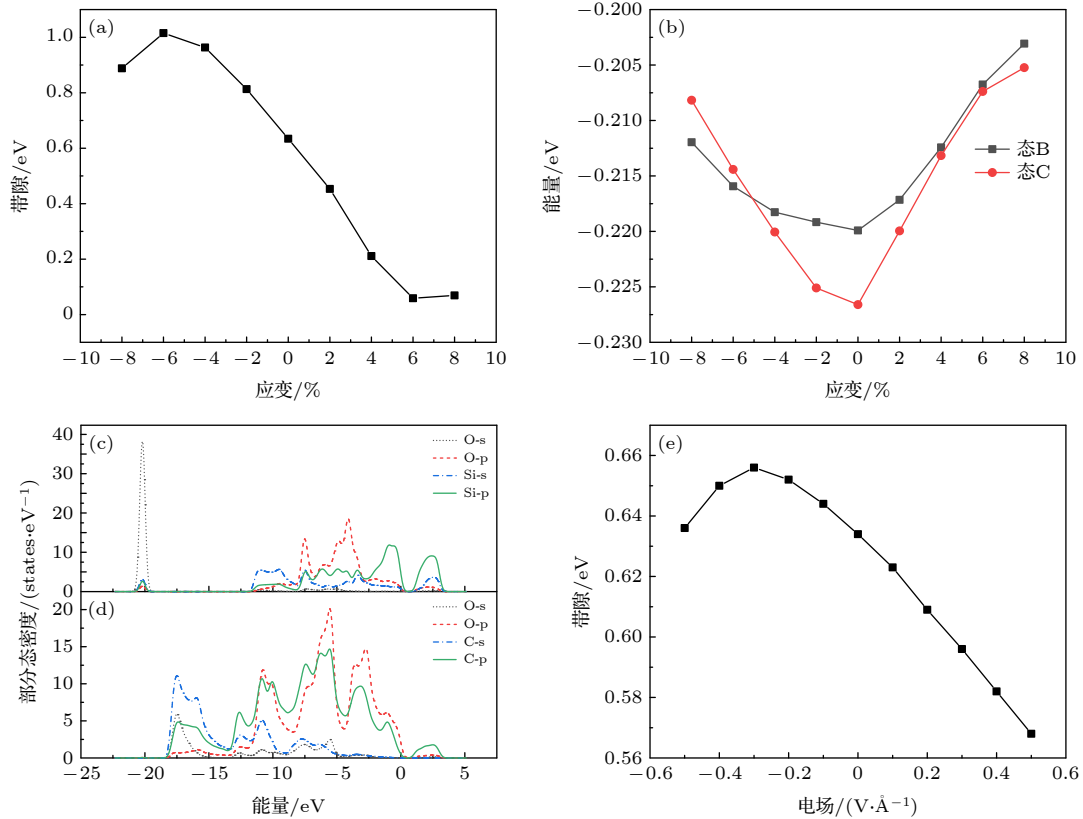


图5 (a) 双轴应变下硅醚/石墨醚异质结构的带隙变化; (b) 双轴应变下态 B 和态 C 的能量; 应变为 -6% 时异质结构中 (c) 硅醚和 (d) 石墨醚的 PDOS 图; (e) 不同垂直电场强度下带隙变化

Fig. 5. (a) Band gap variation of graphether/silicether heterostructure under biaxial strain; (b) energy of states B and C under biaxial strain; the partial density of the state of (c) silicether and (d) graphether in the heterostructure at -6% strain; (e) the band gap variation of silicether/graphether heterostructure under perpendicular electric field.

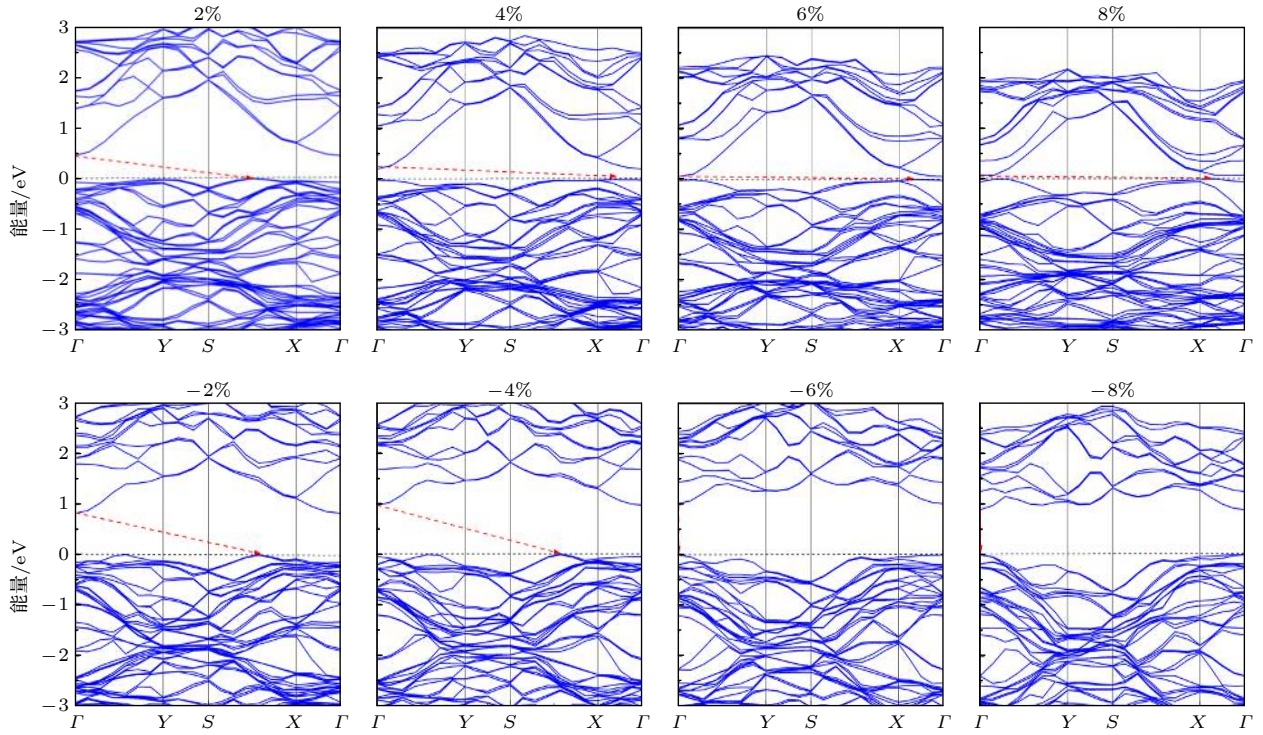


图 6 双轴应变下的能带结构图

Fig. 6. Band structure of silicether/graphether heterostructure under biaxial strain.

分别是 C-2p 和 Si-3p 轨道. 图 5(b) 中在 -4% 到 8% 的应变范围内, 态 B 的能量总是高于态 C 的能量, 因此态 B 代表了 VBM. 随着压缩应变的增加到 -6%, 态 B 的能量降低, 态 C 的能量高于态 B 的能量, 成为了 VBM ( $\Gamma$  点), 使得异质结构有间接带隙转变为直接带隙. 通过观察应变下的能带结构, 发现 VBM 的能量未发生明显变化, CBM 的能量在压缩应变下, 先增加后减小, 在拉伸应变下, 急剧减小. 因此, 双轴应变下, 带隙值主要受 CBM 能量变化影响. 此外, 硅醚/石墨醚异质结构的应变增加, 表明存在从半导体到金属的转变. 这为光学器件的应用提供了显著的优势.

电场可用于调制 VBM 和 CBM 在二维半导体中的位置, 如对 GaGeTe 单层施加垂直于表面的外部电场, CBM 向费米能级移动 [56]. 已有许多研究使用第一性原理对二维异质结构施加外部电场, 并被证明是调控带隙的方法之一 [57–60]. 为了更好地应用于纳米器件中, 对异质结构施加垂直方向的电场进行了计算. 图 5(e) 显示了外加电场作用下硅醚/石墨醚异质结构带隙的变化. 正值是对异质结构体系从底层 (硅醚) 到顶层 (石墨醚) 施加的电场. 计算表明带隙的变化趋势不仅与电场强度有关, 而且与电场方向有关. 从图 5(e) 可以看出, 在

正电场的作用下, 带隙随着电场强度的增大而减小, 当电场强度为  $0.5 \text{ V/\AA}$  时带隙为  $0.57 \text{ eV}$ . 当对异质结构施加负电场时, 在电场强度为  $-0.3 \text{ V/\AA}$  时, 最大带隙达到  $0.66 \text{ eV}$ , 然后随着电场的增大而减小. 这是因为当两种材料组合成异质结构时, 由于净正电荷和负电荷在界面两侧的累积而引起内置电场. 当外部电场施加在异质结构上之后, 在内建电场和外电场的共同作用下异质结构能带边缘相对于费米能级发生移动, 如图 7 所示. 异质结构带隙值对电场强度的线性依赖, 这可以通过斯塔克效应 (Stark effect) [61] 来理解. 值得注意的是, 应用外部电场不会改变方式 X 的间接带隙特性. 因此可以通过外加电场调控硅醚/石墨醚异质结构的带隙, 以提高异质结构的电导率和传输性能.

### 3.3 光学性质

硅醚/石墨醚异质结构中的层间相互作用可以引起不同的光学跃迁 [62,63]. 因此, 这种新型异质结构的光学性质也引起了我们的兴趣. 材料的光学性质可以用介电函数来描述, 用来研究硅醚/石墨醚异质结构光学性质的介电函数为 [64]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2(\omega), \quad (3)$$



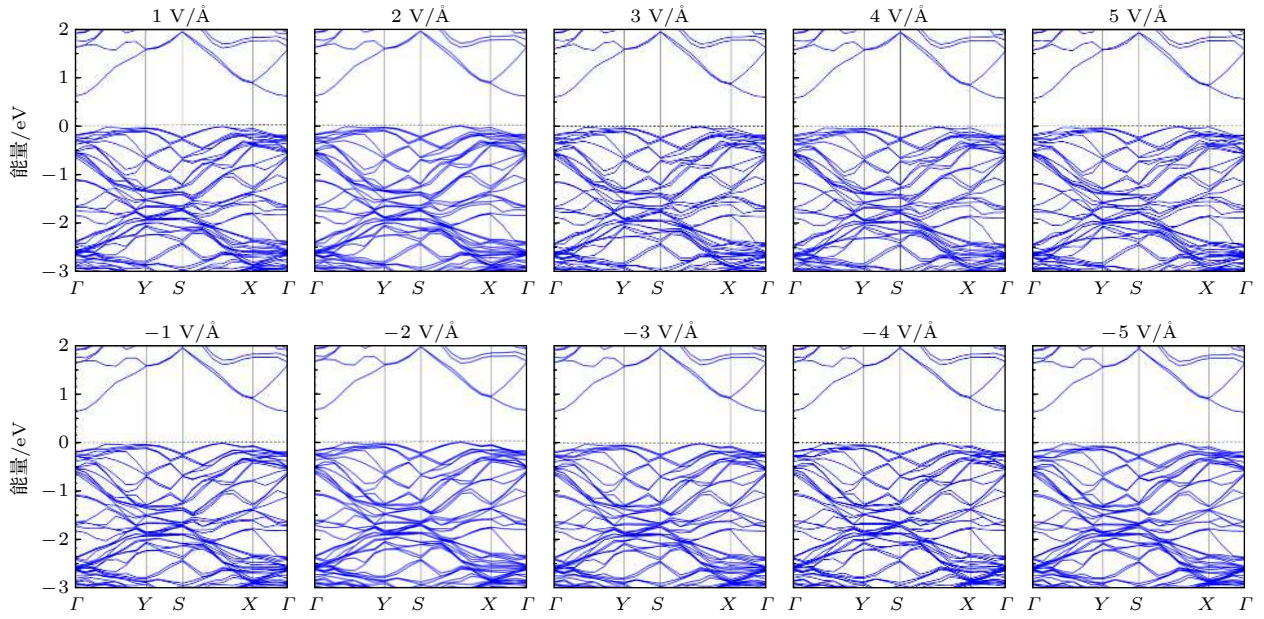


图7 不同垂直电场强度下的能带结构图

Fig. 7. Band structure of silicether/graphether heterostructure under perpendicular electric field.

其中  $\varepsilon_1(\omega)$  和  $\varepsilon_2(\omega)$  分别表示介电函数的实部和虚部. 介电函数的实部和虚部分别描述色散和吸收效应. 根据硅醚/石墨醚异质结构的介电函数, 可以得到包括吸收系数  $\alpha(\omega)$ 、反射率  $R(\omega)$  和能量损失谱  $L(\omega)$  在内的光学性质, 分别表示为

$$\alpha(\omega) = \frac{\sqrt{2}\omega}{c} \left\{ [\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)]^{\frac{1}{2}} - \varepsilon_1(\omega) \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (4a)$$

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon_1 + i\varepsilon_2(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon_1 + i\varepsilon_2(\omega)} + 1} \right|^2, \quad (4b)$$

$$L(\omega) = \text{Im} \left( -\frac{1}{\varepsilon(\omega)} \right) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}. \quad (4c)$$

为了观察硅醚/石墨醚的光吸收能力, 特别是在紫外光区域, 研究了异质结构的光吸收系数. 如图8所示, 为了比较, 在相同的环境条件下分别给出了单个的石墨醚和硅醚的吸收系数. 异质结构的吸收范围从可见光到紫外光区, 在紫外光区出现强峰. 紫外光区的光吸收峰可达  $1.7 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ , 其光吸收效率较高, 与其他用于纳米电子学和光电应用的异质结构<sup>[65]</sup>的最高吸收系数相当. 与硅醚相比, 异质结构的光吸收系数在波长小于 170 nm 范围内得到增强, 而相比于石墨醚, 异质结构的光吸收系数在波长大于 80 nm 范围内得到增强, 大大提高了单层材料的光吸收能力. 此外, 在可见光区域, 异质结构也显示出可观的吸收系数 (在  $1 \times$

$10^4$ — $4 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$  之间), 表明其在光伏应用方面是具有潜力的. 因此, 可以推断异质结构的光吸收增强使其更适合用于光电子器件. 特别是它具有良好的紫外吸收能力, 这使得它在紫外探测方面具有很大的应用潜力.

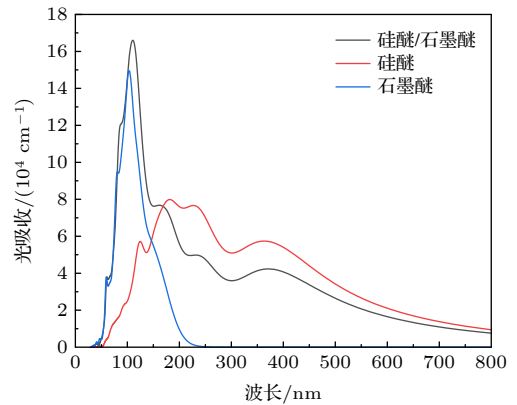


图8 石墨醚、硅醚和硅醚/石墨醚异质结构的光吸收效率

Fig. 8. Optical absorption of silicether, graphether and silicether/graphether heterostructure.

## 4 结 论

综上所述, 通过第一性原理方法研究了硅醚/石墨醚异质结构的结构、电子和光学性质. 结果表明, 硅醚/石墨醚异质结构是一种新型的二维材料. 由于界面距离的相互作用, 我们判断层间距为 2.21 Å 时, 方式 X 的异质结构是最稳定的. 系统研

究了应变和外加电场对硅醚/石墨醚异质结构带隙的影响. 计算结果表明, 带隙在压缩应变下增加, 在拉伸应变下减小, 特别是在压缩应变下, 异质结构由间接带隙半导体转变为直接带隙半导体, 这有利于它在灵敏型光电器件中的应用. 通过外加电场可以将硅醚/石墨醚异质结构的带隙分别调整为 0.66 eV 和 0.57 eV. 此外, 光学性能表明它具有优异的紫外吸收能力. 石墨醚/硅醚的异质结构可能为纳米器件的应用提供一种新型的二维材料.

## 参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D E, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Butler S Z, Hollen S M, Cao L 2013 *ACS Nano* **7** 2898
- [3] Radisavljevic B, Radenovic A, Brivio J, Giacometti V, Kis A 2011 *Nat. Nanotechnol.* **6** 147
- [4] Jiang J, Liang Q, Meng R, Yang Q, Tan C, Sun X, Chen X 2017 *Nanoscale* **9** 2992
- [5] Liu H, Neal A T, Zhu Z, Luo Z, Xu X, Tománek D, Ye P D 2014 *ACS nano* **8** 4033
- [6] Cui H, Zheng K, Zhang Y, Ye H, Chen X 2018 *IEEE Electron Device Lett.* **39** 284
- [7] Ghidui M, Lukatskaya M R, Zhao M Q, Gogotsi Y, Barsoum M W 2014 *Nature* **516** 78
- [8] Xia Y, Mathis T S, Zhao M Q, Anasori B, Dang A, Zhou Z, Cho H, Gogotsi Y, Yang S 2018 *Nature* **557** 409
- [9] Wang H, Wu Y, Yuan X, Zeng G, Zhou J, Wang X, Chew J W 2019 *Adv. Mater.* **30** 1704561
- [10] Li M, Han M K, Zhou J, Deng Q H, Zhou X B, Xue J M, Du S Y, Yin X W, Huang Q 2018 *Adv. Electron. Mater.* **4** 1700617
- [11] Bae S, Kim H, Lee Y, Xu X F, Park J S, Zheng Y, Balakrishnan J, Lei T, Kim H R, Song Y I, Kim Y J, Kim K S, Ozyilmaz B, Ahn J H, Hong B H, Iijima S 2010 *Nat. Nanotechnol.* **5** 574
- [12] Cai Y C, Shen J, Ge G, Zhang Y Z, Jin W Q, Huang W, Shao J J, Yang J, Dong X C 2018 *ACS Nano* **12** 56
- [13] Chen Z P, Xu C, Ma C Q, Ren W C, Cheng H M 2013 *Adv. Mater.* **25** 1296
- [14] Wang G Z, Gao Z, Wang G P, Liu S W, Yang P, Qing Y 2014 *Nano Res.* **7** 704
- [15] Shahzad F, Alhabeib M, Hatter C B, Anasori B, Hong S M, Koo C M, Gogotsi Y, 2016 *Science* **353** 1137
- [16] Han M K, Yin X W, Wu H, Hou Z X, Song C Q, Li X L, Zhang L T, Cheng L F 2016 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 21011
- [17] Ning M Q, Lu M M, Li J B, Chen Z, Dou Y K, Wang C Z, Rehman F, Cao M S, Jin H B 2015 *Nanoscale* **7** 15734
- [18] Qing Y C, Nan H Y, Luo F, Zhou W C 2017 *RSC Adv.* **7** 27755
- [19] Wu F, Xie A, Sun M X, Jiang W C, Zhang K 2017 *Mater. Lett.* **193** 30
- [20] Lü H L, Zhang H Q, Ji G B 2016 *Part. Part. Syst. Char.* **33** 656
- [21] Lan X L, Liang C Y, Wu M S, Wu N, He L A, Li Y B, Wang Z J 2018 *J. Mater. Chem. C* **122** 18537
- [22] He D L, Wang Y, Song S L, Liu S, Deng Y 2017 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9** 44839
- [23] Zhang C, Zhao S, Jin C, Koh A L, Zhou Y, Xu W, Li Q, Xiong Q, Peng H, Liu Z 2015 *Nat. Commun.* **6** 6519
- [24] Wang Z, Ki D, Chen H, Berger H, Macdonald A H, Morpurgo A F 2015 *Nat. Commun.* **6** 8339
- [25] Woessner A, Lundberg M B, Gao Y, Principi A, Alonso-Gonzalez P, Carrega M 2015 *Nat. Mater.* **14** 421
- [26] Wang Y, Ding Y 2015 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** 27769
- [27] Xia C, Xue B, Wang T, Peng Y, Jia Y 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 193107
- [28] Chen X P, Sun X, Yang D G, Meng R S, Tan C J, Yang Q, Liang Q H, Jiang J K 2016 *J. Mater. Chem. C* **4** 10082
- [29] Ares P, Aguilargalindo F, Rodríguez-Samiguel D, Aldave D A, Díaztendero S, Alcamí M, Martín F, Gómezherrerro J, Zamora F 2016 *Adv. Mater.* **30** 6515
- [30] Ji J, Song X, Liu J, Yan Z, Huo C, Zhang S 2016 *Nat. Commun.* **7** 13352
- [31] Davletshin A R, Ustiuzhanina S V, Kistanov A A, Saadatmand D, Dmitriev S V, Zhou K 2018 *Physica B* **534** 63
- [32] Chen X, Yang Q, Meng R, Jiang J, Liang Q, Tan C 2016 *J. Mater. Chem. C* **4** 5434
- [33] Wei W, Dai Y, Niu C, Li X, Ma Y, Huang B 2015 *J. Mater. Chem. C* **3** 11548
- [34] Li X, Chen W, Zhang S, Wang P, Zhong H, Lin S 2015 *Nano Energy* **16** 310
- [35] Cai Y, Pei Q X, Zhang G, Zhang Y W 2016 *J. Appl. Phys.* **119** 065102
- [36] Wang N, Cao D, Wang J, Liang P, Chen X, Shu H 2017 *J. Mater. Chem. C* **5** 9687
- [37] Cao H, Zhou Z, Zhou X, Cao J 2017 *Comput. Mater. Sci.* **139** 179
- [38] Zhu G L, Ye X J, Liu C S 2019 *Nanoscale* **11** 22482
- [39] Zhu G L, Ye X J, Liu C S, Yan X H 2020 *Nanoscale Adv.* **2** 2835
- [40] Wilson N R, Nguyen P V, Seyler K, Rivera P, Marsden A J, Laker Z P L, Constantinescu G C, Kandyba V, Barinov A 2017 *Sci. Adv.* **3** e16018324
- [41] Xie Z F, Sun F W, Yao R, Zhang Y, Zhang Y H, Zhang Z H, Fan J B, Ni L, Duan L 2019 *Appl. Surf. Sci.* **475** 839
- [42] Wang L, Zhou X, Ma T, Liu D M, Gao L, Li X, Zhang J, Hu Y Z, Wang H, Dai Y D, Luo J 2017 *Nanoscale* **9** 10846
- [43] Zhang H 2015 *ACS Nano* **9** 9451
- [44] Liu H, Gao J, Zhao J 2013 *J. Phys. Chem. C* **117** 10353
- [45] Rajagopal A K, Callaway J 1973 *Phys. Rev. B* **7** 1912
- [46] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [47] Hamann D R, Schlüter M, Chiang C 1979 *Phys. Rev. Lett.* **43** 1494
- [48] Tkatchenko A, Scheffler M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 073005
- [49] Zhu J, Schwingenschlögl U 2014 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **6** 11675
- [50] Jappor H R, Saleh Z A, Abdulsattar M A 2012 *Adv. Mater. Sci. Eng.* **2012** 180679
- [51] Peng X, Wei Q, Coppole A 2014 *Phys. Rev. B* **90** 085402
- [52] Wang C, Xia Q, Nie Y, Rahman M, Guo G 2016 *AIP Adv.* **6** 035204
- [53] Li X H, Wang B J, Cai X L, Zhang L W, Wang G D, Ke S H 2017 *RSC Adv.* **7** 28393
- [54] Kou L 2012 *J. Phys. Chem. Lett.* **3** 2934
- [55] Xiong A, Zhou X 2019 *Mater. Res. Express* **6** 075907
- [56] Ke C, Wu Y, Zhou J, Wu Z, Zhang C, Li X, Kang J 2019 *J. Phys. D* **52** 115101
- [57] Chen X F, Lian J S, Jiang Q 2012 *Phys. Rev. B* **86** 125437



- [58] Houssa M, van den Broek B, Scalise E, Pourtois G, Afanas' Ev V, Stesmans A 2013 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** 3702
- [59] Liu Q, Li L, Li Y, Gao Z, Chen Z, Lu J 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 21556
- [60] Li W, Wang T, Dai X, Ma Y, Tang Y 2017 *J. Alloys Compd.* **705** 486
- [61] Leroux M, Grandjean N, Latigt M, Massies J, Gil B, Lefebvre P, Bigenwald P 1998 *Phys. Rev. B* **58** 13371
- [62] Du A, Sanvito S, Li Z, Wang D, Jiao Y, Liao T, Sun Q, Yun H N, Zhu Z, Amal R 2012 *J. Am. Chem. Soc.* **134** 4393
- [63] Hu W, Li Z, Yang J 2013 *J. Chem. Phys.* **138** 054701
- [64] Chen X, Jiang J, Liang Q, Meng R, Tan C, Yang Q, Zhang S, Zeng H 2016 *J. Mater. Chem. C* **4** 7406
- [65] Sun M, Chou J P, Gao J, Cheng Y, Hu A, Tang W, Zhang G 2018 *ACS Omega* **3** 8514

# Theoretical study of optical and electronic properties of silicether/graphether heterostructure\*

Zhang Ying    Liu Chun-Sheng<sup>†</sup>

(College of Electronic and Optical Engineering, Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing 210023, China)

(Received 22 December 2020; revised manuscript received 6 February 2021)

## Abstract

Since the discovery and synthesis of graphene, two-dimensional graphether and silicether materials have been predicted as novel semiconductors. A novel two-dimensional silicether/graphether heterostructure is designed by combining silicether and graphether, which has unique optical and electronic properties due to the properties of a single material synthesized by heterostructures. The electronic and optical properties of silicether/graphether heterostructure are studied by the first-principles calculations based on density functional theory. The binding energy and layer spacing for each of all considered 16 stacking patterns of the heterostructures are calculated. The results show that different stacking patterns have a small effect on the binding energy of the heterostructure. When the layer spacing is 2.21 Å, the stacking pattern in which the concave oxygen atoms of graphether are on the top of the concave oxygen atoms of silicether is the most stable. In addition, it has an indirect band gap of 0.63 eV, which is smaller than that of the silicether and graphether, respectively. By changing the external electric field and the biaxial strain strength, the band gap of the silicether/graphether heterostructure shows tunability. The compressive strain can increase the band gap of silicether/graphether heterostructure, while the band gap decreases with the tensile strain increasing. Especially, when the compressive strain is greater than -6%, the heterostructure undergoes an indirect-to-direct band gap transition, which is beneficial to its applications in optical devices. When the external electric field is applied, the band gap of the heterostructure changes linearly with the strength of the electric field, and the indirect band gap characteristic is maintained. The absorption coefficient of silicether/graphether heterostructure shows a strong peak in the ultraviolet light region. The maximum absorption coefficient can reach up to  $1.7 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$  around 110 nm. Compared with that of monolayer graphether and silicether, the optical absorption of the heterostructure is significantly enhanced within the range from more than 80 nm to less than 170 nm. The results show that silicether/graphether heterostructure has an outstanding optical absorption in the ultraviolet region. Moreover, the silicether/graphether heterostructure also shows considerable absorption coefficient ( $1 \times 10^4$ — $4 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ ) in the visible region, which makes it a potential material in photovoltaic applications. This work may provide a novel material with a promising prospect of potential applications in nanodevices.

**Keywords:** first-principle, silicether/graphether heterostructure, electronic properties, optical properties

**PACS:** 31.15.E-, 61.46.-w, 73.22.-f, 78.20.Ci

**DOI:** 10.7498/aps.70.20202193

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61974068, 11704198).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [csliu@njupt.edu.cn](mailto:csliu@njupt.edu.cn)