

扶手椅型 C_3B 纳米带: 结构稳定性、电子特性及调控效应*

曹胜果 韩佳凝 李占海 张振华†

(长沙理工大学, 柔性电子材料基因工程湖南省重点实验室, 长沙 410114)

(2022 年 12 月 25 日收到; 2023 年 3 月 29 日收到修改稿)

单层 C_3B 是典型的类石墨烯二维材料, 已在实验上成功制备. 采用密度泛函理论方法 (DFT) 研究了扶手椅型单层 C_3B 纳米带的结构稳定性、电子性质及物理调控效应. 计算结果表明: 对于裸边纳米带, 如果带边缘全由 C 原子组成 (AA 型), 则电子相为半导体; 两个带边缘均由 C 与 B 原子混合组成时 (BB 型), 则纳米带的电子相为金属; 而纳米带的一边由 C 原子组成、另一边由 B 与 C 原子混合构成 (AB 型), 则纳米带的电子相为金属. 这说明纳米带边缘的 B 原子对于纳米带成为金属或半导体起决定作用. 而对于 H 端接的纳米带, 它们全部为直接或间接带隙半导体. H 端接的纳米带载流子迁移率一般比裸边纳米带低, 这与它们较大的有效质量及较高的形变势有密切关系. 同时发现半导体性质的纳米带对物理调控非常敏感, 特别是在压应变和外电场作用下, 纳米带的带隙明显变小, 这有利于对光能的吸收和研发光学器件.

关键词: C_3B 纳米带, 结构稳定性, 电子性质, 载流子迁移率, 物理调控

PACS: 71.15.-m, 73.20.At, 73.63.-b, 73.22.-f

DOI: 10.7498/aps.72.20222434

1 引言

石墨烯最早是由石墨经过微机械剥离方法制备而成的二维材料^[1], 其力学、电学及光学性质不同于块体石墨, 特别是能观察到许多新奇的物理现象, 如奇异的量子霍尔效应等, 因而引发了科学界的极大研究兴趣^[2-4]. 石墨烯的成功制备及其在纳米电子器件方面的广泛应用前景, 激励研究者们去探索其他新型二维材料, 使得单层 BN^[5]、硅烯^[6]、磷烯^[7]、过渡金属硫化物 (TMDs)^[8]、砷烯^[9]、锑烯^[10]、 Be_2C ^[11,12] 等二维材料相继被发现和制备. 研究表明: 这些二维材料在器件应用上具有许多比硅基器件更好的性能^[13-18]. 然而, 这些二维材料也存在某些不足, 如石墨烯、硅烯是零带隙材料, 使相关器

件具有极低的开关比, 从而限制了它们在场效应晶体管中的应用. 因此, 研究者常常通过化学或物理方法对二维材料性能进行调控, 以满足不同器件的特定要求. 物理调控主要是通过物理场耦合如施加应力场、外电场等来实现^[19,20]. 此外, 将二维材料裁剪成纳米带也是一种常见的物理调控方法, 例如, 将石墨烯裁剪成一维的纳米带后, 扶手椅型石墨烯纳米带成为带隙随宽度变化的无磁半导体^[21], 锯齿型石墨烯纳米带在反铁磁基态时为磁性半导体^[21,22], 而石墨烯纳米带通过掺杂调控可实现整流、负微分电阻、自旋过滤^[23,24].

在众多的二维材料中, 类石墨烯材料被广泛研究, 特别是其在电子器件方面的应用颇受关注^[25,26]. 二维 C_3B 就是典型的类石墨烯二维材料, 它是由六角蜂窝状 C 及 B 原子环组成的平面结构. Liu 等^[27]

* 国家自然科学基金 (批准号: 61771076)、柔性电子材料基因工程湖南省重点实验室开放基金 (批准号: 202020) 和湖南省研究生创新项目 (批准号: CX20210823) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhzhzhang@csust.edu.cn

基于从头算热力学计算预言了在 NbB₂ 上生成单层 C₃B 的实验可能性, 即在 NbB₂ 上通过碳置换和碳杂质的表面偏析生长 C₃B 片. 此后, Tanaka 等 [28,29] 在 NbB₂(0001) 表面上利用 C 原子的替位掺杂生长出了高结晶均匀 C₃B 蜂窝片. 研究表明: C₃B 蜂窝片是带隙为 0.54 eV 的半导体 [30], 具有良好的电子和光学性质 [31] 及显著的热力学稳定性 [32,33], 且多层堆叠也能调节这些性质 [34–36]. 单层 C₃B 在储氢 [37,38]、催化剂 [39,40]、电池 [41]、传感器 [42–44] 等领域均有重要的应用. 然而, 对于 C₃B 纳米带的研究, 仅涉及 H 端接的锯齿边和裸边情形 [26,45], 所以仍有很大的研究空间, 如实验上制备的纳米带往往是异质原子 (如 H 原子) 端接的. 此外, 应变效应、电场效应等调控效应也需进一步研究, 这对于发展新型纳米器件及探索新的物理现象具有重要意义.

本文利用第一性原理研究了扶手椅型 C₃B 纳米带的结构稳定性、电子性质及物理调控效应. 计算结果表明: 对于裸边纳米带, 它们电子相可以是半导体或金属, 分别对应无 B 原子处于纳米带边缘 (半导体)、B 原子处于纳米带两边缘和一个边缘. 而对于 H 端接的纳米带, 它们全部为直接或间接带隙半导体. 半导体性质的纳米带对物理调控非常敏感, 特别是在压应变和外电场作用下, 纳米带的带隙明显变小, 这有利于对光能的吸收.

2 计算方法

采用密度泛函理论 (DFT) 方法进行几何优化及电子特性计算, 并在 Atomistix ToolKit (ATK) 软件包中实现 [46,47], 此软件包广泛用于各种纳米结构的研究 [48–53]. 为解 Kohn-Sham 方程, 选用 PBE 形式的广义梯度近似 (GGA) 来描述电子之间的交换-关联作用. 价电子的波函数则采用原子轨道的线性组合, 考虑到晶体中原子的静电极化效应, 所有原子选双 ζ 加极化 (DZP) 为基函数组. 原子实则采用 Troullier-Martins 模守恒赝势. 在第一布里渊区 x , y 和 z 方向上采用 $1 \times 1 \times 100$ 的 k 点抽样, 其中 z 为纳米带周期方向. 截断能选为 150 Ry. 在整个计算过程中, 除纳米带周期方向外, 其他两个方向选取 15 Å 的真空胞 (vacuum cell). 几何结构稳定性评估及电子特性的计算都在经过充分结构优化后进行, 直到每个原子上的残余力小于 0.01 eV/Å. 为简单起见, 系统的费米能级设置为零.

载流子迁移率是量度材料输运特性的重要参数. 具有合适带隙与高迁移率的纳米材料对于研发场效应器件及光电器件具有至关重要的作用. 理论研究 [54] 认为无机半导体迁移率与载流子被声子散射有密切关系. 选用形变势理论 [55] 计算迁移率, 对于一维纳米材料, 迁移率可按式估算 [56–58]:

$$\mu = \frac{e\hbar^2 C}{(2\pi k_B T)^{1/2} |m^*|^{3/2} E_1^2}, \quad (1)$$

其中 \hbar 是约化普朗克常数, k_B 是玻尔兹曼常数, T 是温度, 选取 $T = 300$ K, C , m^* 和 E_1 分别是晶体的弹性模量、电子 (或空穴) 有效质量和形变势. 弹性模量由公式 ($C = \partial^2 E_{\text{total}} / \partial \varepsilon^2$) / a_0) 计算, 其中 E_{total} 是一个单胞的总能量, ε 为应变 ($\varepsilon = (a - a_0) / a_0$), 其中 a_0 与 a 分别是在纳米带方向在本征状态与形变时纳米带的晶格常数. 形变势由 $E_1 = \partial E_{\text{edge}} / \partial \varepsilon$ 计算, 其中 E_{edge} 是导带底 (CBM) 或价带顶 (VBM) 的能量. 电子及空穴有效质量利用 $m^* = \hbar^2 (\partial^2 E(k) / \partial k^2)^{-1}$ 进行计算, $E(k)$ 为带边附近的能量色散关系, 而 k 为波矢. 其中电子及空穴有效质量 m^* , 单胞的总能量 E_{total} , 导带底 (CBM) 或价带顶 (VBM) 的能量 E_{edge} 均通过 DFT 计算获得.

3 结果与讨论

3.1 扶手椅边 C₃B 纳米带的几何结构及稳定性

图 1(a) 所示为二维 C₃B 的原子结构, 其菱形单胞由 6 个 C 原子和 2 个 B 原子构成. 优化后的 C—C 键长为 1.428 Å, C—B 键长为 1.566 Å, 与文献 [35, 38] 报道的 C—C 键键长 1.41—1.42 Å, C—B 键长 1.55—1.56 Å 非常接近. 这里仅考虑将二维 C₃B 单层沿 x 方向剪裁而获得扶手椅型纳米带的情况. 全部由 C 原子组成的边缘称为 A 型边, 而由 C, B 原子混合组成的边缘称为 B 型边, 分别用黄色和蓝色表示, 如图 1(a) 所示. C₃B 纳米带宽度用二聚原子链数量 n 进行量度. 如果纳米带两边缘都是 A 型, 记为 n -AA, 如果两个边缘为 B 型, 则记为 n -BB. 如果一个边缘为 A 型, 另外一个边缘为 B 型, 则表示为 n -AB. 同时考虑纳米带的轴线对称情况, 对于 n -AA 和 n -BB 型纳米带, 存在关于轴线是否对称两种情况, 如果纳米带关于轴线是非对称的, 用 (I) 表示, 否则用 (II) 表示. 而对

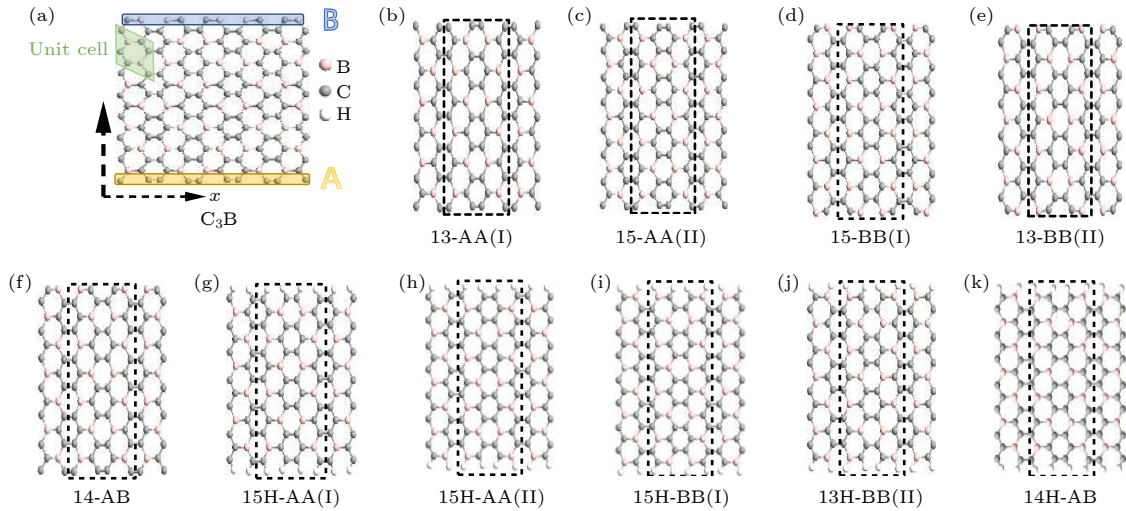


图 1 (a) C_3B 单层原子结构, 其中浅绿色菱形表示它的原胞, 考虑沿 X 轴方向剪裁形成各种扶手椅型纳米带, 其中蓝色、黄色阴影分别表示 A 型、B 型边缘; (b)–(k) 分别表示 13-AA(I), 15-AA(II), 15-BB(I), 13-BB(II), 14-AB, 13H-AA(I), 15H-AA(II), 15H-BB(I), 13H-BB(II), 14H-AB 纳米带, 黑色虚线框表示纳米带单胞

Fig. 1. (a) Atomic structure C_3B monolayer, where light green rhombus represents its primitive cell, tailoring C_3B monolayer along the X -axis direction to form various armchair edged nanoribbons, the blue and yellow shadows indicate the A-type and B-type edges, respectively; (b)–(k) several typical ribbons 13-AA(I), 15-AA(II), 15-BB(I), 13-BB(II), 14-AB, 13H-AA(I), 15H-AA(II), 15H-BB(I), 13H-BB(II), 14H-AB respectively, the black dashed box denotes the unit cell of nanoribbons.

于 n -AB 型纳米带, 关于轴线总是非对称性的, 所以只有 1 种情况. 总之, 根据纳米带边缘原子分布情况及轴线对称性, 扶手椅型 C_3B 纳米带可以分成 5 种不同类型, 相关例子 13-AA(I), 15-AA(II), 15-BB(I), 13-BB(II), 14-AB 如图 1(b)–(f) 所示. 采用 H 原子对纳米带边缘进行端接以清除其边缘的悬挂键, 则纳米带表示为 H-, 相关例子为 13H-AA(I), 15H-AA(II), 15H-BB(I), 13H-BB(II), 14H-AB 如图 1(g)–(k) 所示. 图 1(b)–(k) 中黑色虚线框表示纳米带单胞, 为沿周期方向的最小可重复单元.

以前的研究表明: 二维 C_3B 热力学稳定性非常好, 在较高的温度下仍可保持较好的结构稳定性^[27]. 为了检验裸边和 H 原子端接的扶手椅型 C_3B 纳米带的热稳定性, 采用波恩-奥本海默分子热力学方法, 即在 NVT 系综件下使用温度为 500 K 的 Nose Hoover 热浴, 按每步 1 fs 共运行 8 ps, 获得的结果如图 2(a)–(j) 所示. 显然, 裸边 C_3B 扶手椅纳米带边缘和带内形变都较小 (图 2(a)–(e)), 而对于 H 原子端接的纳米带, 其边缘 H 原子的位置有一定的移动 (图 2(f)–(j)), 但无论是裸边或 H 原子端接的扶手椅纳米带, 都没有观察到结构重构现象, 这表明一维扶手椅型 C_3B 纳米带结构保持较高的热力学稳定性.

为了评估扶手椅型 C_3B 纳米带的能量稳定性,

计算边能定义为 $E_{\text{edge}} = (E_{\text{ribbon}} - n_C E_C - n_B E_B - n_H E_H) / (2l)$, 其中 E_{ribbon} 为裸边或 H 端接纳米带单胞的总能量, E_C 及 E_B 分别为二维 C_3B 单层中 1 个 C 原子及 B 原子能量, E_H 为 H 分子中 1 个原子的能量. n_C , n_B 及 n_H 分别为 C_3B 扶手椅边纳米带单胞中 C 原子、B 原子及 H 原子的数量 (裸边情况, n_H 取 0), l 为纳米带单胞沿长度方向的晶格常数, 计算结果如图 2(k), (l) 所示. 可以清楚地看到裸边及 H 端接纳米带的边能随纳米带宽度的变化情况. 裸边纳米带在宽度较小时, 边能可为正, 但随着纳米带宽度增大, 其边能线性降低, 说明随着纳米带宽度增大其能量稳定性不断提高. 同时可看到 H 原子边缘端接后, 对应的边能更低, 即纳米带能量稳定性提高, 同时边能随着纳米带宽度增大也线性降低. 这些结果表明增大纳米带宽度或利用 H 原子边缘端接, 有利于提高纳米带能量稳定性. 此外, 可以看出不同类型的扶手椅纳米带 (AA(I), AA(II), BB(I), BB(II), AB, H-AA(I), H-AA(II), H-BB(I), H-BB(II), H-AB) 的边能随宽度变化也有类似规律.

3.2 裸边扶手椅型 C_3B 纳米带电子特性

为了讨论裸边 C_3B 纳米带电子特性, 以 13-AA(I), 15-AA(II), 15-BB(I), 13-BB(II) 及 14-

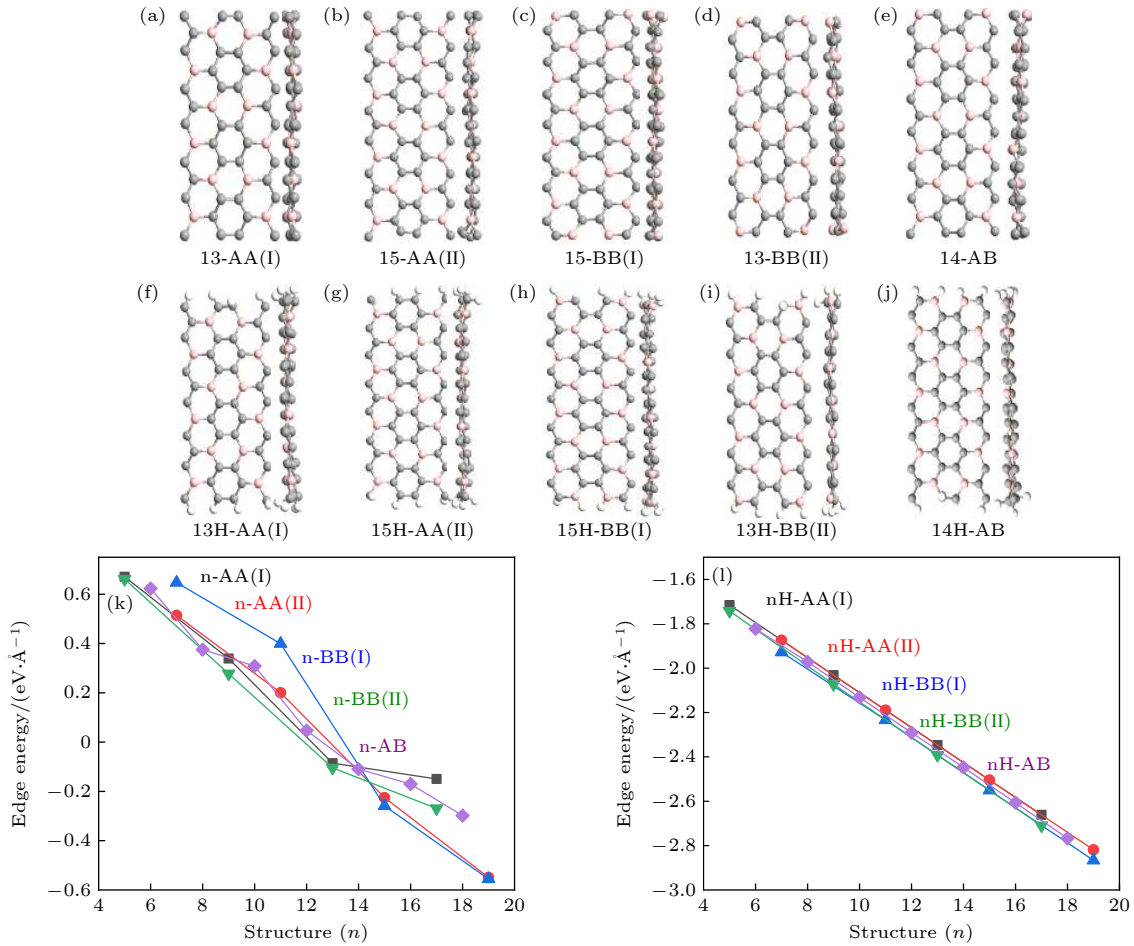


图 2 裸边和 H 端接 C₃B 纳米带的热力学稳定性模拟, 即在 NVT 系综条件下使用温度为 500 K 的 Nose Hoover 热浴, 按每步 1 fs 运行 8 ps 后获得的结果 (a) 13-AA(I), (b) 15-AA(II), (c) 15-BB(I), (d) 13-BB(II), (e) 14-AB, (f) 13H-AA(I), (g) 15H-AA(II), (h) 15H-BB(I), (i) 13H-BB(II), (j) 14H-AB; (k) 裸边 C₃B 纳米带边能随宽度变化; (l) H 端接 C₃B 纳米带边能随宽度变化

Fig. 2. Examining the thermal stability of bare-edge and H-terminated C₃B ribbons, the obtained results for running the simulation by 8 ps with a time step of 1 fs under the Nosé heat bath scheme, which is used in the NVT ensemble at 500 K: (a)13-AA(I), (b)15-AA(II), (c)15-BB(I), (d)13-BB(II), (e)14-AB, (f)13H-AA(I), (g)15H-AA(II), (h)15H-BB(I), (i)13H-BB(II), (j)14H-AB; (k) edge energy versus widths of the bare-edge C₃B nanoribbons; (l)edge energy versus widths of the H-terminated C₃B nanoribbons.

AB 纳米带为例, 计算其能带结构、态密度以及投影态密度 (PDOS), 这里的投影态密度是指将总态密度投影到 B 原子及 C 原子上, 计算结果如图 3 所示. 显然, 13-AA(I) 及 15-AA(II) 纳米带为半导体 (图 3(a), (b)), 而 15-BB(I) 及 13-BB(II) 纳米带都有两条能带穿过费米能级, 所以为金属 (图 3(c), (d)). 特别有趣的是 14-AB 纳米带, 也呈现金属性质 (图 3(e)), 说明边缘 B 原子对材料性质的影响大于边缘 C 原子, 同时能带交叉的点基本位于费米能级上. 相比之下, 在 15-BB(I) 及 13-BB(II) 纳米带中, 对应的能带交叉的点上移到费米能级以上, 说明 BB 型纳米带比 AB 型纳米带的金属性强. 从 PDOS 可以看出, 13-AA(I) 及

15-AA(II) 导带主要是 B 原子贡献的, 而价带主要是 C 原子贡献的. 而 15-BB(I), 13-BB(II) 及 14-AB 纳米带在费米能级及附近的态密度是由 B 及 C 原子共同贡献的. 为进一步分析裸边扶手椅 C₃B 纳米带电子相变化规律, 计算了不同宽度纳米带的带结构, 相应的带隙如表 1 所示. 从表 1 可以看出, 所有 *n*-AA 型纳米带的电子相均为半导体, 不管它们的几何结构关于纳米带轴线是否对称. 表 1 中数据表明, 所有 *n*-AA 型纳米带的电子相均为半导体, 不管它们的几何结构关于纳米带轴线是否对称, 而所有 *n*-AB 及 *n*-BB 型纳米带的电子相均为金属, 不管 *n*-BB 的几何结构关于纳米带轴线是否对称. 换言之, 如果裸边扶手椅型 C₃B 纳米带

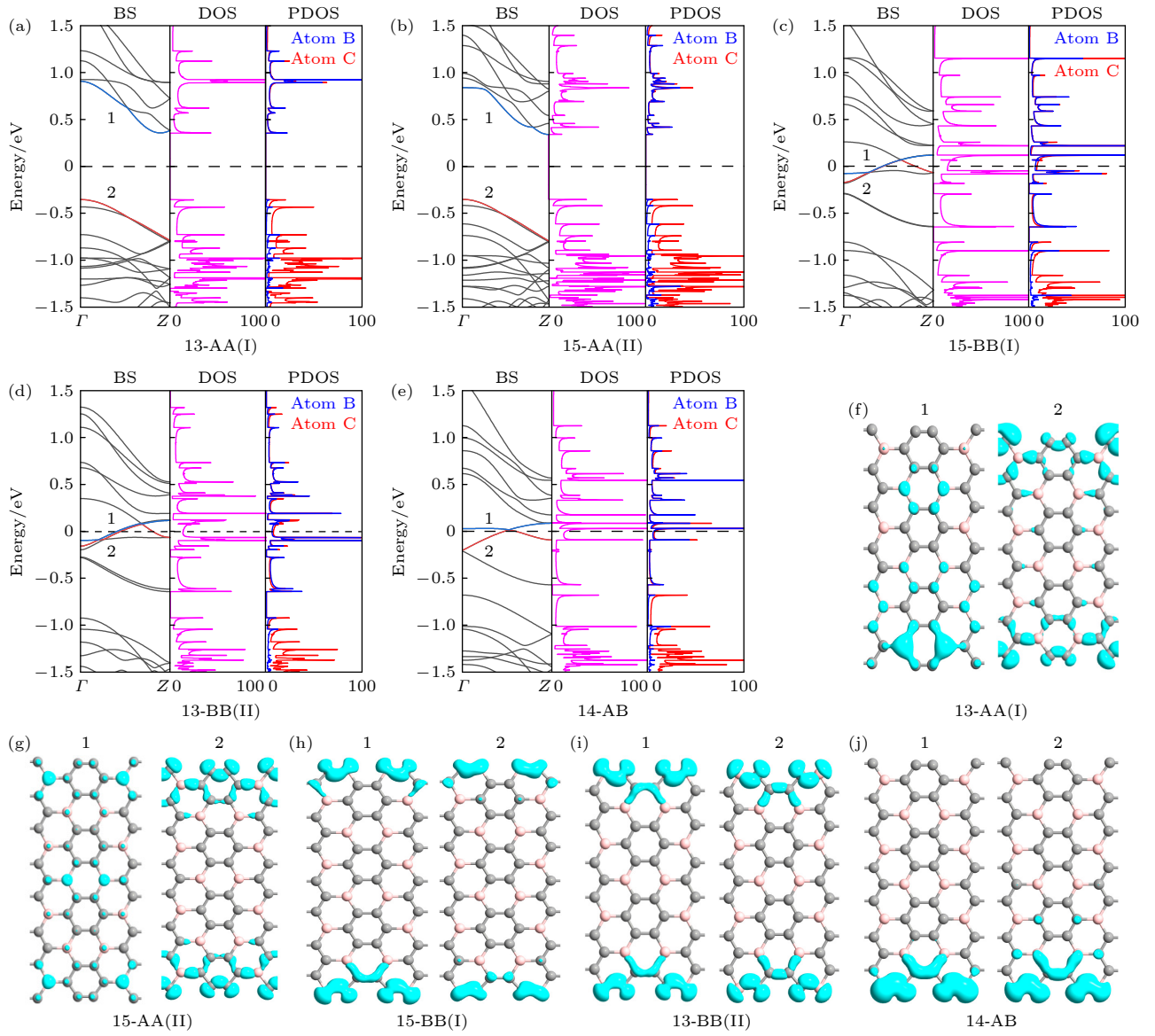


图3 几种典型裸边 C_3B 纳米带的能带结构、态密度 (DOS) 和原子投影态密度 (PDOS) (a) 13-AA(I), (b) 15-AA(II), (c) 15-BB(I), (d) 13-BB(II), (e) 14-AB; 相对应纳米带的能带 1 和 2 的部分电荷密度: (f) 13-AA(I), (g) 15-AA(II), (h) 15-BB(I), (i) 13-BB(II), (j) 14-AB, 部分电荷密度等值面设置为 $0.03 |e| \cdot \text{\AA}^{-3}$

Fig. 3. Band structure, density of states (DOS), and atom-projected density of states (PDOS) of several typical bare-edge C_3B ribbons: (a) 13-AA(I), (b) 15-AA(II), (c) 15-BB(I), (d) 13-BB(II), (e) 14-AB. Partial charge density of subbands 1 and 2 for the corresponding ribbons: (f) 13-AA(I), (g) 15-AA(II), (h) 15-BB(I), (i) 13-BB(II), (j) 14-AB. The isosurface for partial charge density is set to $0.03 |e| \cdot \text{\AA}^{-3}$.

表1 不同宽度裸边 C_3B 纳米带带隙

Table 1. Band gaps of bare-edge C_3B nanoribbons with different widths.

Structure	Band gap/eV	Structure	Band gap/eV	Structure	Band gap/eV
5-AA(I)	0.928	19-AA(II)	0.696	13-BB(II)	0
9-AA(I)	0.730	7-BB(I)	0	17-BB(II)	0
13-AA(I)	0.710	11-BB(I)	0	8-AB	0
17-AA(I)	0.710	15-BB(I)	0	10-AB	0
7-AA(II)	0.718	19-BB(I)	0	12-AB	0
11-AA(II)	0.675	5-BB(II)	0	14-AB	0
15-AA(II)	0.692	9-BB(II)	0	16-AB	0

的带边全由 C 原子组成 (AA 型), 则其电子相为半导体; 当纳米带两边均由 C 与 B 原子混合组成时 (BB 型), 则纳米带的电子相为金属; 而纳米带一边由 C 原子组成、另一边为 B 与 C 原子混合边时 (AB 型), 则纳米带的电子相也为金属, 即纳米带边缘的 B 原子, 对于纳米带成为 (半导体) 金属起决定作用, 这一点已从图 3(c)—(e) 清楚观察到.

在图 3(a)—(e) 中靠近费米能级或穿过费米能级的子能带, 分别标注为能带 1 (蓝色) 和能带 2 (红色), 它们对电子相及电子输运起决定作用, 为了直观地呈现各原子对这些能带的贡献, 计算部分电荷密度如图 3(f)—(j) 所示. 显然, 对于 13-AA(I) 纳米带, 能带 1 主要由 B 原子贡献的, 且集中在纳米带的下半部分, 能带 2 主要是由纳米带边缘 C 原子所贡献. 而对于 15-AA(II) 纳米带, 能带 1 主要由对称的 B 原子贡献, 而能带 2 主要由纳米带边缘对称 C 原子所贡献. 对于 13-BB(II) 和 15-BB(I) 纳米带, 能带 1 和能带 2 主要由边缘原子贡献, 即 B 和 C 原子均有明显贡献. 对于 14-AB 纳米带的能带 1 和能带 2, 主要由 B 型边缘的 B 及 C 原子共同贡献的. 因此可见, 能带 1 和能带 2 基本上来源于纳米带的边缘态, 所以 B 原子是否处在纳米带边缘, 决定纳米带的电子性质 (半导体或金属). 这些结论与上文分析相一致.

3.3 H 端接 C_3B 扶手椅纳米带的电子特性

以裸边纳米带 13-AA(I), 15-AA(II), 15-BB(I), 13-BB(II) 及 14-AB 为例, 研究它们被 H 端接后的能带结构、态密度 (DOS) 以及原子的投影态密度 (PDOS), 计算结果如图 4 所示. 显然, 15H-BB(I), 13-BB(II) 及 14H-AB 纳米带的能带结构与裸边 15-BB(I), 13-BB(II) 及 14-AB 能带结构 (见图 3) 对比, 其带隙有明显变化, 即纳米带从金属型变化到半导体型. 从图 3(c)—(e) 可以看出, 费米能级及附近的 DOS 较低, 且来源于边态 (见图 3(h)—(j)), 所以当 H 原子端接消除了边缘悬挂键后, 自然打开了带隙. 15H-BB(I) 和 13H-BB(II) 纳米带为直接带隙半导体, 而 14H-AB 纳米带为间接带隙半导体. 13H-AA(I), 15H-AA(II) 也为间接带隙半导体, 与 H 原子端接前相同, 但带隙增大. 从 DOS 可知, 所有纳米带导带主要由 B 原子贡献, 而价带主要由 C 原子贡献. 由于 H 原子的投影态密度较小, 在 PDOS 分析中忽略 H 原

子的贡献. 13-AA(I), 15-AA(II) 在 H 饱和前后的 DOS 的差别不大, 而能带的带隙发生变化, 主要是能带 1 的带尾 (z) 位置变化以及能带 2 的带头 (Γ) 位置变化. 对于 15-BB(I) 和 13-BB(II) 纳米带在 H 饱和前后带隙变化较大, 主要是因为 C 及 B 原子在 DOS 中的分布变化较大. 14-AB 纳米带在 H 饱和后的带隙比 15H-BB(I) 和 13H-BB(II) 纳米带的大. 本工作也研究了 H 端接纳米带的电子结构的尺度效应, 相关纳米带的带隙如表 2 所列. 显然, 所有纳米带均呈现半导体性质, 且随着纳米带宽度增大, 带隙不断减小.

为了呈现 H 端接后哪些原子对半导体性纳米带 13H-AA(I), 15H-AA(II), 15H-BB(I), 13H-BB(II) 及 14H-AB 边带 (图 4(a)—(e) 中标记为能带 1 和能带 2) 的形成有贡献, 分别计算了它们的部分电荷密度, 如图 4(f)—(j) 所示. 可以看到所有纳米带的能带 1 和能带 2 主要由内部原子所贡献, 特别是能带 2 更为明显, 这是因为纳米带的悬挂键被 H 原子的饱和所消除. 对于 13H-AA(I) 及 15H-AA(II) 及 14H-AB 纳米带, 它们的边带的电荷密度在空间分布非常相似, 即能带 1 主要由带内 C 原子和 B 原子共同贡献, 其中 B 原子有更多的贡献, 而能带 2 也是主要由带内 C 原子和 B 原子共同贡献, 但 C 原子有更多的贡献. 而对于 15H-BB(I) 及 13H-BB(II) 纳米带, 它们边带的电荷密度在空间分别非常相似, 即内部 C 原子和 B 原子对于能带 1 几乎有相当的贡献, 但能带 2 主要由 C 原子所贡献.

3.4 载流子迁移率

以图 3 及图 4 中涉及的半导体性纳米带为例, 计算它们的 m^* , C , E_1 及迁移率, 如图 5 所示. 从图 5(a) 可以看到, 对于裸边纳米带 13-AA(I) 及 15-AA(II), H 原子端接后即 13H-AA(I) 及 15H-AA(II) 纳米带, 其有效质量变化很小, 而对于裸边时为金属, H 原子端接后成半导体的纳米带, 即 15H-BB(I), 13H-BB(II) 及 14H-AB 纳米带, 它们的电子及空穴的有效质量都较大. 从形变势 E_1 来看 (见图 5(b)), 对 H 原子端接的纳米带, 不论是电子还是空穴的形变势都明显增大, 大的形变势意味着载流子输运容易受到声子散射, 所以异质原子 H 端接纳米带后能显著改变纳米带边缘载流子的声子散射状况, 从而导致大的形变势. H 原子端接

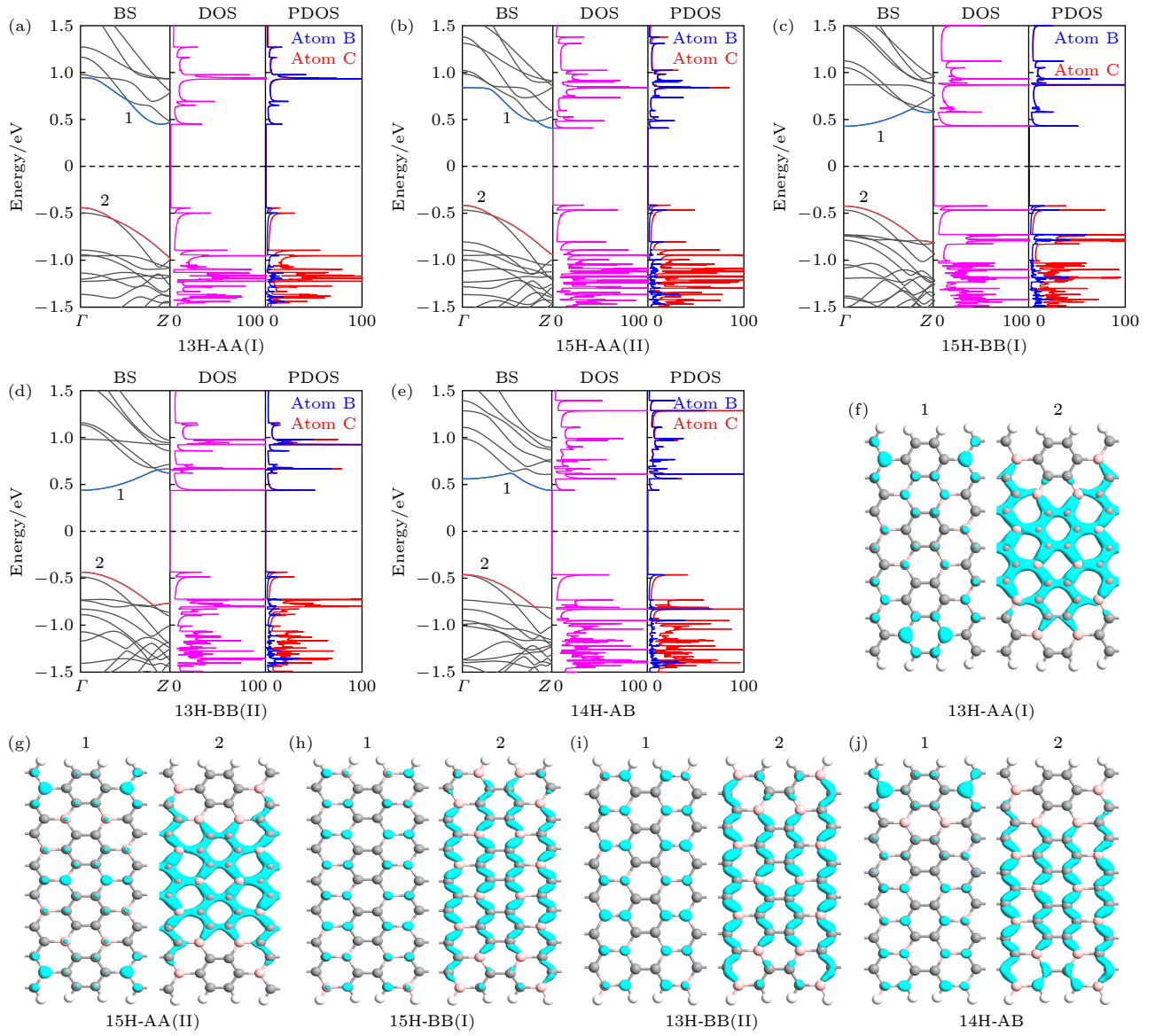


图 4 几种典型的 H 端接的 C_3B 纳米带的能带结构, 态密度 (DOS) 和原子投影态密度 (PDOS) (a) 13H-AA(I), (b) 15H-AA(II), (c) 15H-BB(I), (d) 13H-BB(II), (e) 14H-AB; 相对应纳米带的能带 1 和 2 的部分电荷密度: (f) 13H-AA(I), (g) 15H-AA(II), (h) 15H-BB(I), (i) 13H-BB(II), (j) 14H-AB, 部分电荷密度等值设为 $0.03 |e| \cdot \text{\AA}^{-3}$

Fig. 4. Band structure, density of states (DOS) and atom-projected density of states (PDOS) for several typical H-terminated C_3B ribbons: (a) 13H-AA(I), (b) 15H-AA(II), (c) 15H-BB(I), (d) 13H-BB(II), and (e) 14H-AB. Partial charge density of subbands 1 and 2 for the corresponding ribbons: (f) 13H-AA(I), (g) 15H-AA(II), (h) 15H-BB(I), (i) 13H-BB(II), and (j) 14H-AB. The isosurface for partial charge density is set to $0.03 |e| \cdot \text{\AA}^{-3}$.

表 2 H 端接 C_3B 纳米带的带隙
Table 2. Band gaps for H-terminated C_3B nanoribbons.

Structure	Bandgap/eV	Structure	Bandgap/eV	Structure	Bandgap/eV
5 H-AA(I)	1.753	19 H-AA(II)	0.774	13 H-BB(II)	0.872
9 H-AA(I)	1.098	7 H-BB(I)	1.040	17 H-BB(II)	0.833
13 H-AA(I)	0.890	11 H-BB(I)	0.907	8 H-AA(II)	1.157
17 H-AA(I)	0.809	15 H-BB(I)	0.850	10 H-AA(II)	1.014
7 H-AA(II)	1.263	19 H-BB(I)	0.820	12 H-AB(I)	0.953
11 H-AA(II)	0.930	5 H-BB(II)	0.976	14 H-AB(I)	0.897
15 H-AA(II)	0.823	9 H-BB(II)	0.948	16 H-AB(I)	0.869

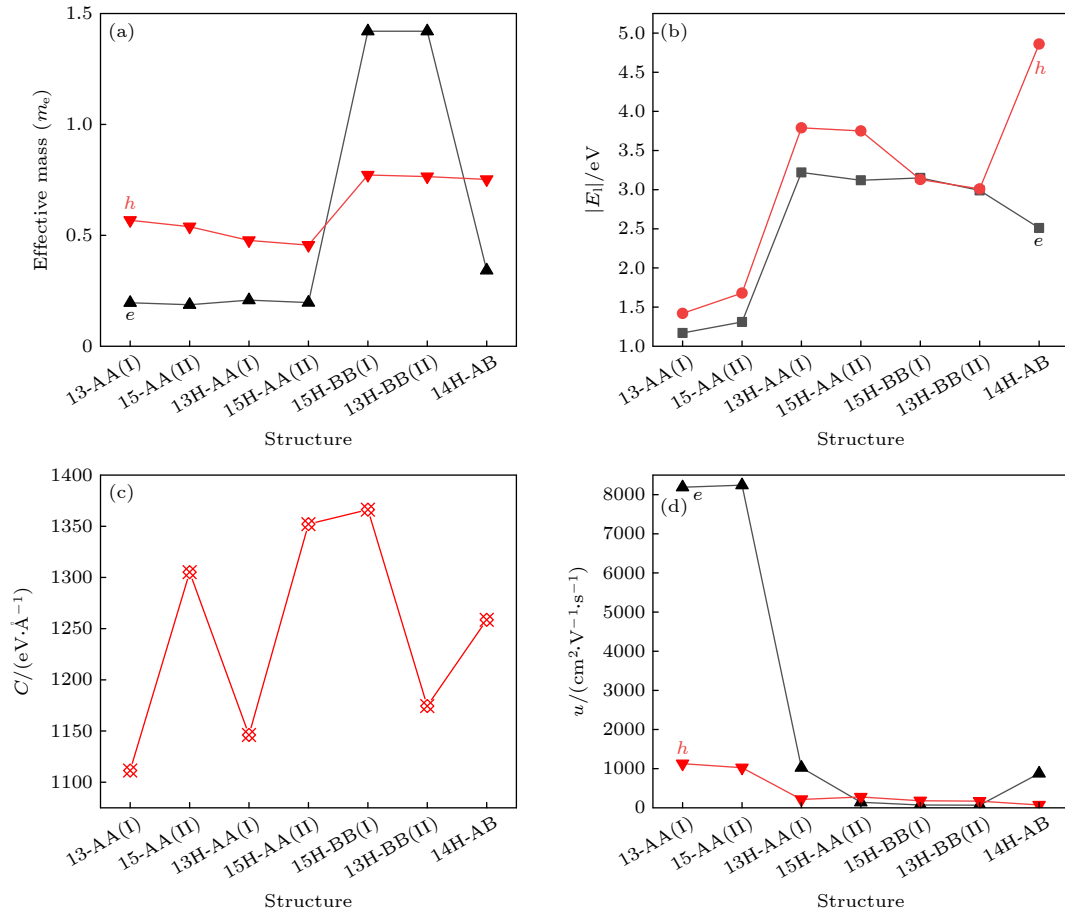


图 5 不同类型 C_3B 纳米带的 (a) 有效质量, (b) 形变势, (c) 弹性模量以及 (d) 载流子迁移率 (其中 h 为空穴, e 为电子)

Fig. 5. (a) Effective mass, (b) deformation potential, (c) elastic modulus, and (d) carrier mobility for different types of C_3B nanoribbons (h is expressed as holes, e is expressed as electrons).

纳米带的弹性模量比裸边情况的拉伸模量都有所增大 (见图 5(c)), 这意味着 H 端接纳米带边缘后提高了纳米带抵抗机械形变的能力。

基于上述数据, 计算的载流子迁移率如图 5(d) 所示. 对于呈半导体性质的纳米带而言, 由 H 原子端接的纳米带载流子迁移率更低 (与 13-AA(I) 和 15-AA(II) 比较), 这与它们较大的有效质量及较高的形变势有密切关系. 裸边的纳米带呈现出大的电子迁移率和空穴迁移率, 13-AA(I) 以及 15-AA(II) 的电子迁移率分别为 $8190.59 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 和 $8242.95 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$, 空穴迁移率分别为 1127.12 和 $1024.2 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$. 同时发现 14H-AB 纳米带有一定的载流子极化现象, 其电子迁移率为 $878.6246 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$, 空穴迁移率仅为 $71.87712 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$, 二者相差 1 个数量级。

3.5 应变调控效应

施加外力改变纳米结构的电子特性是广泛应

用的调控方法. 以 13-AA(I) 为例研究电子结构的应变调控效应, 这里考虑沿着带长方向 (z 方向) 施加应变 ε . 如图 6(a) 所示, 应变定义为 $\varepsilon = (a - a_0)/a_0$, 其中 a_0 与 a 分别是在输运方向本征状态与形变时纳米带的晶格常数. 显然, ε 为正值时, 对应拉应变, 否则为压应变. 图 6(b) 为纳米带的能带结构随应变的变化情况, 可以看出边带的能量位置随应变有明显变化, 充分反映几何结构-电子特性之间的依赖关系. 在压应变作用下, 纳米带带隙不断变小, 最终变为金属, 而在拉应变作用下, 则始终为半导体, 但在较高的拉应变下, 带隙略有变小, 带隙随应变的变化细节如图 6(c) 所示, 显然, 带隙对压应变比较敏感, 特别在 $-10\% \leq \varepsilon \leq -8\%$ 范围内, 带隙随应变快速减小, 同时, 带隙的类型也发生了变化, 从间接带隙的半导体 ($\varepsilon = -8\%$) 变为金属 ($\varepsilon = -10\%$), 这是因为纳米带在压应变下, 带内原子间距变小, 从而使邻近原子的空间势垒变小以及波函数的重叠增大, 轨道的离域作用

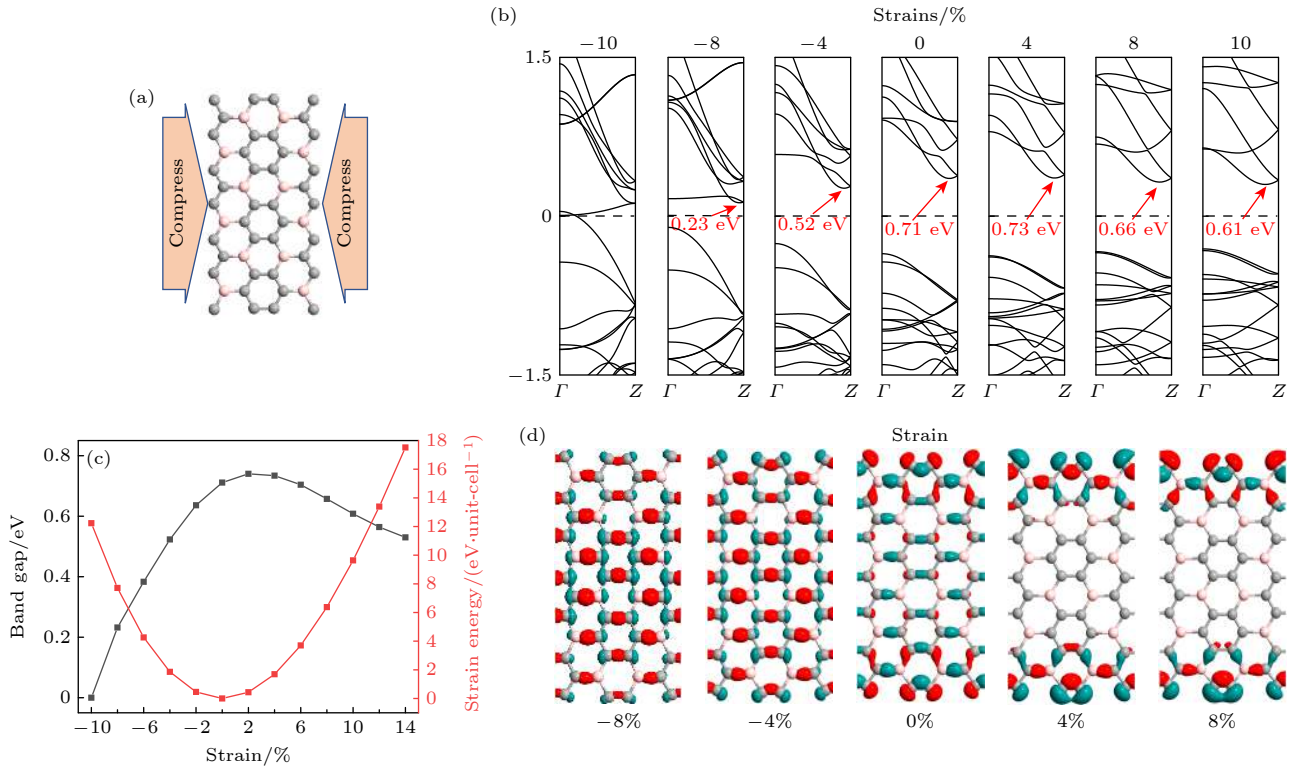


图 6 13-AA(I) 纳米带的应变调控效应 (a) 纳米带压应力示意图; (b) 能带结构随施加应变值的变化; (c) 带隙及应变能随施加应变值的变化; (d) 13-AA(I) VBM 在 Gama 点的布洛赫态, 布洛赫态等值面为 $0.1 |e| \cdot \text{\AA}^{-3}$

Fig. 6. The strain regulation effect of 13-AA(I) ribbon: (a) Schematic diagram of compressive stress in nanoribbons; (b) variation of energy band structure with applied strain; (c) band gap and the strain energy with the applied strain; (d) 13-AA(I) bloch state of VBM at Gama point. The isosurface value is set as $0.1 |e| \cdot \text{\AA}^{-3}$.

增强, 这有利于电子的共有化, 所以其电子相表现为纳米带变为窄带隙半导体, 甚至成为金属. 而对于拉应力, 能带结构响应较弱, 这与拉应力导致原子共价键键长变长, 原子间相互作用变弱有关.

为了检查纳米带在各种应变下的形变是否具有可恢复性, 计算形变能定义为 $\Delta E = E_{\text{strain}} - E_{\text{unstrain}}$, 其中 E_{strain} 和 E_{unstrain} 分别为施加应变与未施加应变时纳米带单胞的总能量, 计算结果如图 6(c) 所示. 在研究的应变范围内, 形变能随应变的变化未出现能量突变现象, 整个形变能曲线较为光滑, 这表明纳米带处于弹性形变范围内. 图 6(d) 所示为在几个典型应变下, 在 Γ 点的 VBM 的布洛赫态. 显然, 施加拉应变时, 这个波函数局域在纳米带边缘, 与本征情形 (带内有分布, 但以边缘分布为主) 比较, 有一定变化, 但变化较小, 这表明拉应变发生时纳米带的电子特性变化不大 (见图 6(b)). 然而, 施加压应力则不同, VBM 的布洛赫态的空间分布出现明显改变, 其分布由边缘为主转变为以带内为主, 意味着压应力发生时会导致纳米带的电子特性较大的变化 (见图 6(b)). 图 7 所示为几个

典型半导体纳米带带边 (CBM 及 VBM) 随压缩应变的变化. 可以看出这些纳米带的带边对压缩应变都比较敏感, 变化趋势与 13-AA(I) 纳米带情况类似 (见图 6(b)), 即随着压缩应变的增大, 其带隙逐渐减小, 最后变为金属. 这种精确可控的电子性质可以在机械开关中得到很好的应用 [49].

3.6 电场调控效应

最后, 我们以 14H-AB 纳米带为代表, 研究外加电场对纳米带电子结构的调控效应, 外加电场如图 8(a) 所示, 这里, 我们将由纳米带下端指向上端的方向规定为正电场方向, 否则为负方向. 图 8(b) 所示为能带结构随外加电场强度的变化情况, 显然, 电场具有显著的调控效应, 如明显地改变纳米带的带隙, 其变化趋势如图 8(c) 所示, 即无论在正电场还是负电场的作用下, 纳米带的带隙都随着外加电场强度的增加而变小. 当外加正电场从 0 V/nm 增至 2 V/nm 时, 纳米带都为间接带隙的半导体. 到 3 V/nm 时, 纳米带从半导体变成了金属. 而在负电场作用下, 带隙也是变小的, 最后变为金属.

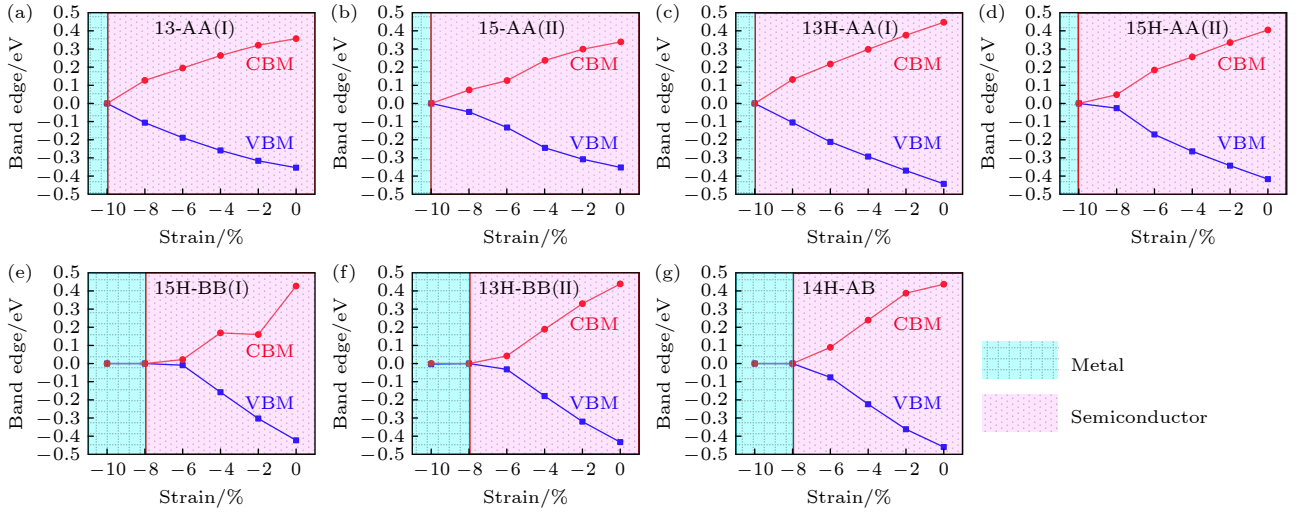


图 7 C_3B 纳米带带边 (CBM 及 VBM) 随应变变化 (a) 13-AA(I); (b) 15-AA(II); (c) 13H-AA(I); (d) 15H-AA(II); (e) 15H-BB(I); (f) 13AH-BB(II); (g) 14H-AB

Fig. 7. Band edges (CBM and VBM) of C_3B nanoribbons change with strain: (a) 13-AA(I); (b) 15-AA(II); (c) 13H-AA(I); (d) 15H-AA(II); (e) 15H-BB(I); (f) 13AH-BB(II); (g) 14H-AB.

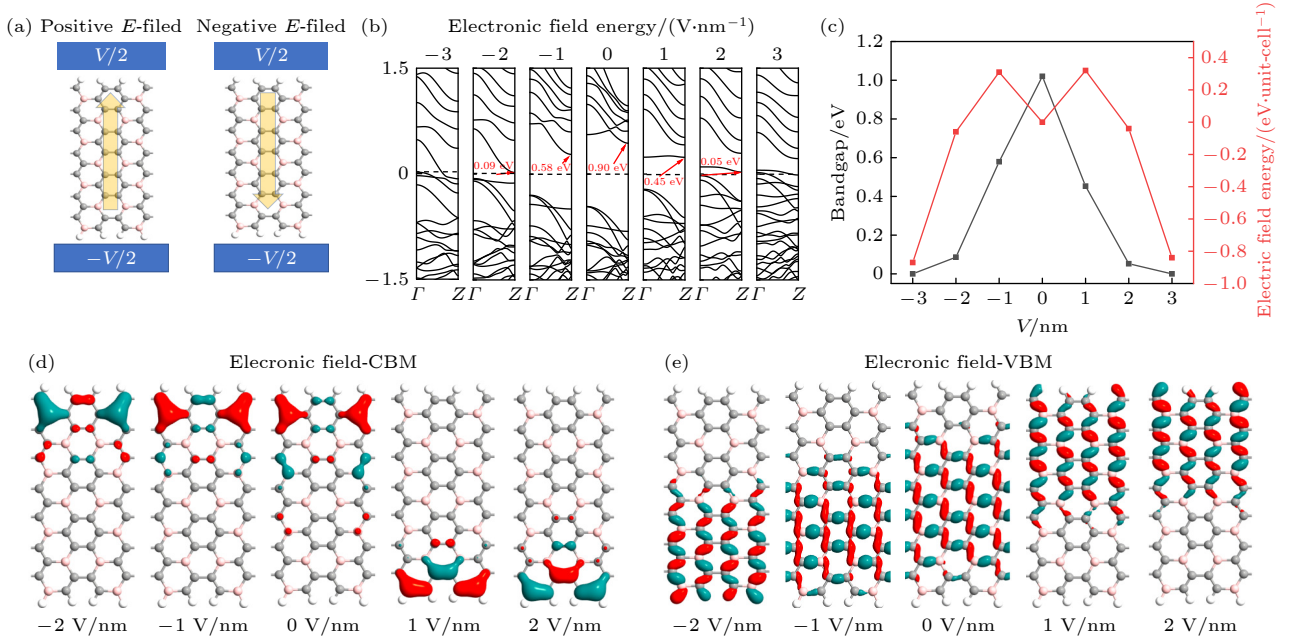


图 8 (a) 14H-AB 纳米带的电场调控效应; (b) 能带结构随电场变化; (c) 带隙及电场能随电场变化; (d), (e) CBM 和 VBM 的布洛赫态能随电场变化, 布洛赫态等值面为 $0.1 |e| \cdot \text{\AA}^{-3}$

Fig. 8. (a) Electric field regulation effect of ribbon 14H-AB; (b) band structure changes with the electric field; (c) band gap and electric field energy changes with the electric field; (d), (e) Bloch states of CBM and VBM changes with the electric field, their isosurface is set to $0.1 |e| \cdot \text{\AA}^{-3}$.

为了描述在电场作用下系统能量稳定性的变化, 我们计算了不同电场作用下系统能量的改变量, 定义 $\Delta E = E_E - E_0$, 其中 E_E 是一个纳米带单胞在加电场时的能量, 而 E_0 是一个纳米带单胞在未加电场时的能量. 计算结果也呈现在图 8(c) 内, 显然系统的能量随电场强度明显变化. 当外加正电场从 0 V/nm 增至 1 V/nm 时, 系统能量略有增大,

但继续增大电场, 系统能量减小到未加电场能量以下, 电场越大而能量却越低, 这说明随着外加电场的增大, 系统的能量稳定性提高. 外加负电场时, 随着电场强度增加, 系统的能量有类似的变化. 这是因为在电场作用下系统的电荷密度重新分布, 按密度泛函理论, 它的总能量 (包括静电相互作用能及交换-关联能) 会发生相应变化.

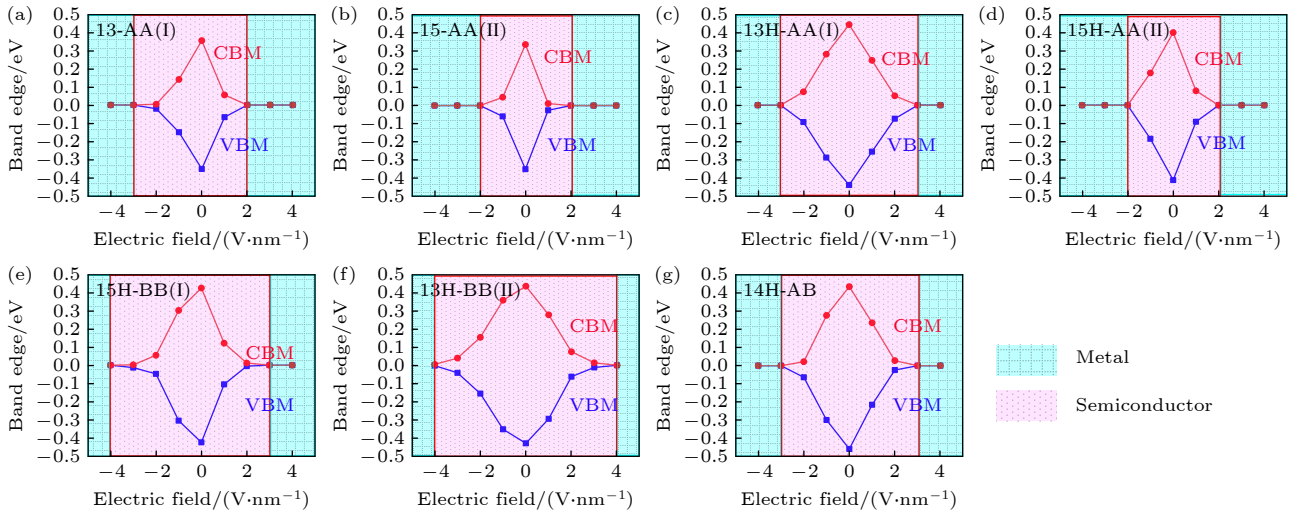


图9 C_3B 纳米带带边 (CBM、VBM) 随外部电场的变化 (a) 13-AA(I); (b) 15-AA(II); (c) 13H-AA(I); (d) 15H-AA(II); (e) 15H-BB(I); (f) 13AH-BB(II); (g) 14H-AB

Fig. 9. Band edges for the C_3B nanoribbon varies with external electric field: (a) 13-AA(I); (b) 15-AA(II); (c) 13H-AA(I); (d) 15H-AA(II); (e) 15H-BB(I); (f) 13AH-BB(II); (g) 14H-AB.

为说明施加电场时带隙的变化规律 (见图 8(b), (c)), 计算 14H-AB 纳米带 CBM 和 VBM 在几个特定电场时的 Bloch 态 (对应电子密度), 如图 8(d)—(e) 所示. 可以看到施加不同电场时, Bloch 态定域在实空间的不同位置, 这是因为电场改变了纳米带内各部位的静电势能, 从而使 Kohn-Sham 方程的解 (Bloch 态) 发生相应变化所致. 对于 CBM (图 8(d)), 可以看到在无电场时其定域在纳米带上边缘, 但施加正电场时, Bloch 态移动到纳米带下边缘, 由于施加的正电场由下方指上方 (见图 8(a) 左图), 这使得纳米带下边缘的电子的势能降低, 所以 CBM 在能量空间向下移动 (见图 8(b)). 施加负电场时, CBM 的 Bloch 态保持在纳米带上边缘, 由于施加的负电场由上方指下方 (见图 8(a) 右图), 使得纳米带上边缘的电子的势能降低, 所以 CBM 在能量空间也向下移动 (见图 8(b)). 而对于 VBM (图 8(e)), 可以看到在无电场时其定域在纳米带内部, 但施加正电场时, Bloch 态移动到纳米带上半部分, 由于施加的正电场由下方指上方 (见图 8(a) 左图), 这使得纳米带的上半部分电子的势能升高, 所以 VBM 在能量空间向上移动 (见图 8(b)). 施加负电场时, VBM 的 Bloch 态移到纳米带下半部分, 由于施加的负电场由上方指下方 (见图 8(a) 右图), 使得纳米带下半部分的电子的势能也是升高, 所以 VBM 在能量空间也向上移动 (见图 8(b)). 总之, 无论施加正电场或负电场, CBM 在能量空间总是向下移

动, 而 VBM 在能量空间总是向上移动, 所以随电场强度增大纳米带带隙变小, 甚至出现金属相, 与图 8(b) 的计算情况完全一致.

本文也研究了其他纳米带的带隙随电场的变化情况, 发现金属性纳米带对电场的调节不敏感, 如纳米带 15-BB(I), 13-BB(II) 及 14-AB 在横向电场作用下, 一直呈现金属性质不变. 而对于半导体性纳米带来说, 如 13-AA(I), 15-AA(II), 13H-AA(I), 15H-AA(II), 15H-BB(I), 13AH-BB(II), 它们的 CBM 及 VBM 随电场的变化情况与纳米带 14H-AB 情况非常相似, 如图 9 所示, 即无论是在正电场还是负电场的作用下, 随电场强度增大, 带隙迅速减小 (CBM 及 VBM 快速地朝着费米能级相向移动), 然后再缓慢减小, 最后变成金属. 众所周知, 窄带隙材料更有利于对太阳光的吸收, 这是因为窄带隙往往对应强的可见光和红外光吸收, 而在太阳光中, 可见光和红外光能量占比最大, 接近 95%, 所以窄带隙材料对于研发纳米光学器件有重要意义.

4 总 结

采用密度泛函理论方法研究相关扶手椅型纳米带的结构稳定性、电子性质及物理调控效应. 计算的边能表明这些纳米带的能量稳定性非常高, 且增大纳米带宽度或利用 H 原子边缘端接, 有利于提高纳米带能量稳定性. 波恩-奥本海默分子热动

力学方法模拟表明无论是裸边或 H 原子端接的扶手椅纳米带, 未观察到结构重构现象, 这说明纳米带结构能保持较高的热力学稳定性. 研究也发现, 对于裸边纳米带, 如果其是 AA 型结构, 即带边缘全由 C 原子组成, 则电子相为半导体; 如果其是 BB 型结构, 即两个带边缘均由 C 与 B 原子混合组成时, 则纳米带的电子相为金属; 如果其是 AB 型结构, 即纳米带的一边由 C 原子组成、另一边由 B 与 C 原子混合构成, 则纳米带的电子相也为金属. 这说明纳米带边缘的 B 原子, 对于纳米带成为金属或半导体起决定作用. 而对于 H 端接的纳米带, 它们全部为直接或间接带隙半导体. H 端接的纳米带载流子迁移率一般比裸边纳米带低, 这与它们较大的有效质量及较高的形变势有密切关系. 同时发现半导体性质的纳米带对物理调控非常敏感, 特别是在压应变和外电场作用下, 纳米带的带隙明显变小, 这有利于对光能的吸收.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonosn S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V, Dubonos S V, Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197
- [3] Zhang Y, Tan Y W, Stormer H L, Kim P 2005 *Nature* **438** 201
- [4] Kim Y J, Bae G Y, Chun S, Park W 2016 *J. Nanosci. Nanotechnol* **16** 2769
- [5] Blase X, Rubio A, Louie S G, Cohen M L 1995 *Phys. Rev. B* **51** 6868
- [6] Cahangirov S, Topsakal M, Aktürk E, Sahin H, Ciraci S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 236804
- [7] Kuang W, Hu R, Fan Z Q, Zhang Z H 2019 *Nanotechnology* **30** 145201
- [8] Xiao D, Liu G B, Feng W, Xu X, Yao W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 196802
- [9] Zhang S, Yan Z, Li Y, Chen Z, Zeng H 2015 *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** 3112
- [10] Zhang S, Xie M, Li F, Yan Z, Li Y, Kan E, Liu W, Chen Z, Zeng H 2016 *Angew. Chem.* **128** 1698
- [11] Yang B, Zhang X, Zhao M 2017 *Nanoscale* **9** 8740
- [12] Ding C, Gao H, Geng W, Zhao M 2021 *Nanoscale Adv* **3** 1127
- [13] Palsgaard M, Gunst T, Markussen T, Thygesen K, Brandbyge M 2018 *Nano. Lett.* **18** 7275
- [14] Wines D, Ersan F, Ataca C 2020 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** 46416
- [15] Zhu M, Zhang L, Li X, He Y, Li X, Guo F, Zang X, Wang K, Xie D, Li X, Wei B, Zhu H. 2015 *J. Mater. Chem. A* **3** 8133
- [16] Midya A, Ghorai A, Mukherjee S, Maiti R, Ray S 2016 *J. Mater. Chem. A* **4** 4534
- [17] Sun F, Liu R, Suo Y Q, Niu L L, Fu H Y, Ji W F, Li Z L 2019 *Acta. Phys. Sin.* **68** 178502
- [18] Liu R, Bao D L, Jiao Y, Wan L W, Li Z L, Wang C K 2014 *Acta. Phys. Sin.* **6** 068501
- [19] Hu Y, Zhang S, Sun S, Xie M, Cai B, Zeng H 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 122107
- [20] Pereira V M, Neto A H C 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 046801
- [21] Son Y W, Cohen M L, Louie S. G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 216803
- [22] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Nature* **444** 347
- [23] Niu L L, Fu H Y, Suo Y Q, Liu R, Sun F, Wang S S, Zhang G P, Wang C K, Li Z L 2021 *Physica E* **128** 114542
- [24] Fu H Y, Sun F, Liu R, Suo Y Q, Bi J J, Wang C K, Li Z L 2019 *Phys. Lett. A* **383** 867
- [25] Aftab S, Samiya M, Liao W, Iqbal M W, Ishfaq M, Ramachandiraiah K, Ajmal H M S, Haque H M U, Yousuf S, Ahmed Z, Khan M U, Rehman A U, Iqbal M Z 2021 *J. Mater. Chem. C* **9** 3998
- [26] He T, Lan C, Zhou S, Li Y, Yin Y, Li C, Liu Y 2021 *J. Mater. Chem. C* **9** 3846
- [27] Liu S Y, Liu S, Li D J, Dang H, Liu Y, Xue S, Xue W, Wang S 2013 *Phys. Rev. B* **88** 115434
- [28] Tanaka H, Kawamata Y, Simizu H, Fujita T, Yanagisawa H, Otani S, Oshima C 2005 *Solid. State. Commun.* **136** 22
- [29] Ding Y, Wang Y, Ni J 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 073111
- [30] Miyamoto Y, Rubio A, Louie S G, Cohen M L 1994 *Phys. Rev. B* **50** 18360
- [31] Zhang Y, Wu Z F, Gao P F, Fang D Q, Zhang E H, Zhang S L 2018 *RSC. Adv.* **8** 1686
- [32] Senturk A E, Oktem A S, Konukman A E S 2020 *Mol. Simul.* **46** 879
- [33] Su Y, Cao S, Shi L B, Qian P 2020 *Appl. Surf. Sci.* **531** 147341
- [34] Liu G, Wu M S, Ouyang C Y, Xu B 2013 *Mod. Phys. Lett. B* **27** 1350110
- [35] Wu Y, Xia W, Zhang Y, Zhu W, Zhang W, Zhang P 2020 *Phys. Rev. Appl.* **14** 014073
- [36] Ozdemir B, Barone V 2015 *Comput. Mater. Sci.* **109** 248
- [37] Yang Z, Ni J 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 183109
- [38] Yang Z, Ni J 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 253117
- [39] Zhang H, Tang Y, Chai H, Chen W, Zhao M, Dai X 2019 *Mol. Phys.* **117** 125
- [40] Meng C, Zhao K, Yang M, Liang Y, Bu X 2021 *Phys. E* **132** 114762
- [41] Qie Y, Liu J, Wang S, Gong S, Sun Q 2018 *Carbon* **129** 38
- [42] Zhao J, Cheng N, He Y 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 19567
- [43] Zhang C, Jiao Y, He T, Bottle S, Frauenheim T, Du A 2018 *J. Phys. Chem. Lett.* **9** 858
- [44] Zhao P, Wan Y, Zhang S, Gao A, Guo P, Jiang Z, Zheng J 2020 *Phys. Status. Solidi. RRL* **14** 2000012
- [45] Dutta S, Wakabayashi K 2013 *J. Mater. Chem. C. Mater.* **1** 4854
- [46] Brandbyge M, Mozos J L, Ordejon P, Taylor J, Stokbro K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401
- [47] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 245407
- [48] Hu J K, Tan J X, Wu D, Zhang Z H, Fan Z Q 2021 *Appl. Surf. Sci.* **560** 149858
- [49] Xu Y H, Deng X Q, Sun L, Fan Z Q, Zhang Z H 2022 *Acta. Phys. Sin.* **71** 046102 (in Chinese) [徐永虎, 邓小清, 孙琳, 范志强, 张振华 2022 物理学报 **71** 046102]
- [50] Tang J X, Fan Z Q, Deng X Q, Zhang Z H 2022 *Acta. Phys. Sin.* **71** 116101 (in Chinese) [汤家鑫, 范志强, 邓小清, 张振华 2022 物理学报 **71** 116101]
- [51] He X, Deng X Q, Sun L, Zhang Z H, Fan Z Q 2022 *Appl.*

- Surf. Sci.* **578** 151844
- [52] Chen H L, Han J N, Deng X Q, Fan Z Q, Sun L, Zhang Z H 2022 *Appl. Surf. Sci.* **598** 153756
- [53] Chen H L, Zhang L, Deng, X Q, Sun L, Zhang Z H, Fan Z Q 2021 *J. Mater. Chem. C* **9** 12904
- [54] Hwang E, Sarma S D 2008 *Phys. Rev. B* **77** 115449
- [55] Bardeen J, Shockley W. 1950 *Phys. Rev.* **80** 72
- [56] Hu R, Li Y H, Zhang Z H, Fan Z Q, Sun L 2019 *J. Mater. Chem. C* **7** 7745
- [57] Dong Q X, Hu R, Fan Z Q, Zhang Z H 2018 *Carbon* **130** 206
- [58] Han J N, He X, Fan Z Q, Zhang Z H 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 1830

Structural stability, electronic properties, and physical modulation effects of armchair-edged C₃B nanoribbons*

Cao Sheng-Guo Han Jia-Ning Li Zhan-Hai Zhang Zhen-Hua[†]

(Hunan Provincial Key Laboratory of Flexible Electronic Materials Genome Engineering,
Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China)

(Received 25 December 2022; revised manuscript received 29 March 2023)

Abstract

C₃B monolayer is a typical graphene-like two-dimensional material, which has been successfully prepared experimentally. Here, we use the density functional theory to study the structural stability, electronic properties and physical regulation effects of its armchair-edged nanoribbons. The results show that for the bare-edged nanoribbons, if the ribbon edges are composed of C atoms completely (AA-type), their electronic phase is a semiconductor; when both ribbons edges consist of C and B atoms (BB-type) jointly, their electronic phase is a metal; if one edge of the ribbon is composed of C atoms and the other edge is comprised of B and C atoms (AB-type), their electronic phase is also a metal. This suggests that the B atom located at the ribbon edge plays an important role in determining whether nanoribbons is a metal or semiconductor. While for the H-terminated nanoribbons, they are all direct or indirect band-gap semiconductors. The carrier mobility of H-terminated nanoribbons is generally lower than that of bare-edged nanoribbon, which is closely related to their larger effective mass and higher deformation potential values. Meanwhile, it is found that the semiconducting nanoribbons are very sensitive to physical regulation, especially under applied compressive strain and external electric field, the band gap of the nanoribbons becomes very smaller, which is favorable for the absorption of light energy and development of novel optical devices.

Keywords: C₃B nanoribbon, structural stability, electronic properties, carrier mobility, physical regulation

PACS: 71.15.-m, 73.20.At, 73.63.-b, 73.22.-f

DOI: 10.7498/aps.72.20222434

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61771076), the Hunan Provincial Key Laboratory of Flexible Electronic Materials Genome Engineering, China (Grant No. 202020), and the Hunan Provincial Innovation Foundation For Postgraduate, China (Grant No. CX20210823).

[†] Corresponding author. E-mail: zhzhang@csust.edu.cn

扶手椅型 C_3B 纳米带: 结构稳定性、电子特性及调控效应

曹胜果 韩佳凝 李占海 张振华

Structural stability, electronic properties, and physical modulation effects of armchair-edged C_3B nanoribbons

Cao Sheng-Guo Han Jia-Ning Li Zhan-Hai Zhang Zhen-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 117101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20222434

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222434>

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

Fe_3GeTe_2 纳米带的结构稳定性、磁电子性质及调控效应

Structure stability, magneto-electronic properties, and modulation effects of Fe_3GeTe_2 nanoribbons

物理学报. 2019, 68(20): 208502 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191103>

非金属原子掺杂的GaN纳米管: 电子结构、输运特性及电场调控效应

Non-metallic atom doped GaN nanotubes: Electronic structure, transport properties, and gate voltage regulating effects

物理学报. 2022, 71(11): 116101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212342>

单层 CrI_3 电荷输运性质和光学性质应变调控的第一性原理研究

First-principles study of strain-tunable charge carrier transport properties and optical properties of CrI_3 monolayer

物理学报. 2022, 71(20): 207102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221019>

Si_n 团簇/石墨烯($n \leq 6$)结构稳定性和储锂性能的第一性原理计算

First-principles study of structural stability and lithium storage property of Si_n clusters ($n \leq 6$) adsorbed on graphene

物理学报. 2021, 70(19): 198101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210521>

二维 XO_2 ($X = Ni, Pd, Pt$)弹性、电子结构和热导率

Elastic constants, electronic structures and thermal conductivity of monolayer XO_2 ($X = Ni, Pd, Pt$)

物理学报. 2021, 70(24): 246301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211015>

二维 SiP_2 同素异构体结构预测及其电子性质的第一性原理研究

First-principles study of structure prediction and electronic properties of two-dimensional SiP_2 allotropes

物理学报. 2022, 71(23): 236101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220853>