

编号: CDUT-2020-7

中文标题: 打破六角硼烯中的电子离域获得可调能隙

英文标题: **Breakdown of the electron delocalization in hexagonal borophene toward tunable energy gap**

入藏号: WOS:000520021200023

中国科学院文献情报中心期刊分区 (升级版): 工程技术 二区/Top

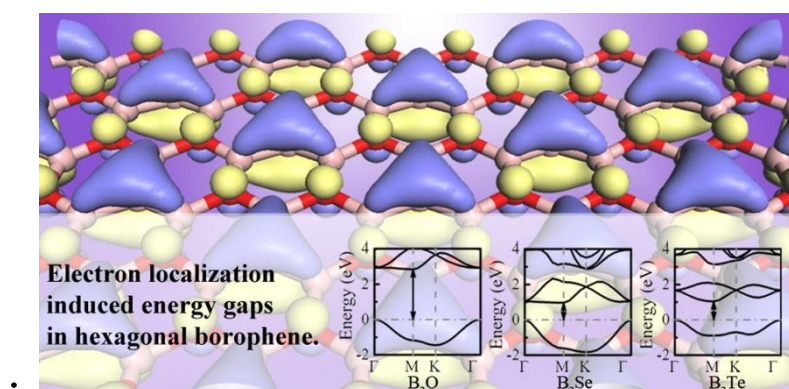
作者: 刘佳, 陈显飞, 黄艺, 张文涛, 向盼, 肖蓓蓓

来源出版物: **APPLIED SURFACE SCIENCE** 卷 507, 文献号: 144940

第一地址: 成都理工大学

关键词: 二维材料, 第一原理, 六角硼烯, 能隙调制

代表图



摘要: 硼烯的同素异构体中由于多中心键的存在, 其主要展现出金属性; 能隙值的缺乏限制了其在微电子和光电子领域中的应用。本文我们提出利用硫族原子掺杂, 打破六角硼烯中的电子离域特性, 从而在硼烯中引入禁带。通过第一性原理计算, 我们得到了一组由硼-硫族元素组成的直接带隙半导体材料 (B_2X , $X = O, S, Se, Te$); 杂化密度泛函 HSE06 计算得到的能隙值分别为 2.84, 0.97 和 1.04 eV, 该能隙值还可以通过外部应力进行有效地调节, 且其电子有效质量与报道的 MoS_2 相当。此外, B_2X 单层还展现出良好的可见光吸收性能, 并随层数的增加而增强。本论文的研究结果提供了一种在六角硼烯中引入能隙值的方法, 为硼烯在柔性电子器件、光子电子期间和光伏领域中的应用提供了可能。

文章链接地址 <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433219337572>