

硼、铝和镓掺杂对硅纳米管电子结构和光电性质的影响

秦成龙 罗祥燕 谢 泉*

(贵州大学大数据与信息工程学院, 新型光电子材料与技术研究所, 贵阳 550025)

摘要: 基于密度泛函理论的第一性原理计算, 研究了本征硅纳米管(SiNTs)的几何结构, 以及Ⅲ族元素B、Al、Ga掺杂对单壁锯齿型(14,0)SiNTs稳定性、电子结构和光学性质的影响。结果表明, 褶皱型SiNTs为SiNTs稳定存在的结构, B、Al、Ga掺杂能够提高SiNTs的稳定性。本征(14,0)SiNTs属于窄带隙金属材料, 通过B、Al、Ga的分别掺杂, SiNTs的带隙变宽, 实现了SiNTs从金属性向半导体性质的转变。随着Ⅲ族元素原子序数的增大, 其掺杂体系的稳定性不断降低, 相应的带隙也不断减少。B、Al、Ga掺杂的单壁锯齿型(14,0)SiNTs具有近乎一致的光学性质, 对于紫外光有着很强的吸收特性, 并且对于红外和可见光吸收也有着不错的提升。

关键词: 掺杂; 稳定性; 电子结构; 光学性质

中图分类号: TB33

文献标识码: A

文章编号: 1001-4861(2020)11-2071-09

DOI: 10.11862/CJIC.2020.229

Electronic Structures and Optoelectronic Properties of Silicon Nanotubes Doped by B, Al and Ga

QIN Cheng-Long LUO Xiang-Yan XIE Quan*

(Institute of Advanced Optoelectronic Materials and Technology, College of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang 550025, China)

Abstract: We used density functional theory (DFT) to study the stable geometry structures and electronic structures of X-doped (X=B, Al and Ga) single-walled (14,0) silicon nanotubes (SiNTs). The results show that the stable structure of SiNTs is a puckered tubular structure; the stability of SiNTs can be improved by doping with B, Al and Ga. Intrinsic (14,0) SiNTs is a narrow band-gap metal materials. The band gaps of SiNTs become wider, and realizes the transition from metal to semiconductor by doping with B, Al and Ga. With the atomic number of group Ⅲ elements increases, the stability of its doping system continues to decrease, and the corresponding band gap also decreases. B, Al and Ga doped single-wall zigzag (14,0) SiNTs have nearly uniform optical properties, which have strong optical absorption for ultraviolet light and a good improvement on infrared and visible light absorption.

Keywords: doping; stability; electronic structure; optical properties

0 引言

随着碳纳米管的发现以及单壁碳纳米管的成功合成^[1-3], 越来越多的研究者致力于纳米管的研究。硅作为碳在周期表中同一族的元素, 有着与碳

相似的性质, 因此硅纳米管(SiNTs)成为新一代纳米管的有力候选材料之一。SiNTs可以通过单层的蜂窝状纸片(类似于石墨烯)卷曲而成, 它的结构同样可以通过手性参数表示, 根据手性参数的不同也可以分为锯齿型($n, 0$)、扶手椅型(n, n)和手性型(n, m)。

收稿日期: 2020-04-16。收修改稿日期: 2020-08-16。

国家自然科学基金(No.61264004)和贵州省高层次创新型人才培养项目(黔科合人才(2015)4015)资助。

*通信联系人。E-mail: qxie@gzu.edu.cn

大量研究表明,碳纳米管倾向于 sp^2 杂化从而能够稳定地存在,而SiNTs更倾向于形成金刚石型的 sp^3 杂化,且SiNTs的键长相对于碳纳米管更长,这就导致了 π 键的重叠度较低,进一步降低了SiNTs的稳定性^[4-6]。为了提高单壁SiNTs的稳定性,研究者用氢、氧、过渡金属元素掺杂提升了SiNTs的稳定性^[5-11]。以上研究表明掺杂不仅提高了SiNTs的稳定性,同时也可以改变它的电子结构以及光学性质。

对于本征SiNTs,大量研究表明其不够稳定,在电子特性方面有着类似于碳纳米管的手性规律^[17-21]。在SiNTs掺杂方面,Yu等^[13]发现,经过P掺杂单壁扶手型SiNTs的能带结构从间接带隙变为直接带隙,禁带宽度变窄,导电性增强,为SiNTs在光电器件方面的应用提供了理论基础。He等^[6]通过自旋极化密度泛函研究了Co掺杂的单壁SiNTs,研究表明Co原子的掺杂不仅有效地提高了纳米管的稳定性,并且在一定程度上提高了纳米管的导电性,为纳米设备的设计提供了理论基础。此外铝^[15]、碳和锗^[16]的掺杂也有研究。Durgun等^[5]研究了过渡金属掺杂小直径SiNTs的稳定性和电子特性,发现原本不稳定的SiNTs在加入过渡金属后能够稳定地存在,并且获得了一些强磁性。

硅是IV族元素,而III族元素是硅在周期表中的

临近主族元素,这就决定了它们的化学性质更加接近,在掺杂的时候更能形成稳定的结构。III和V族的混合纳米管^[5]也成了当下研究热点,例如BN纳米管、GaN纳米管和AlN纳米管。研究表明III和V族的混合纳米管相比于SiNTs有着更好的稳定性以及新的电子特性。我们针对III族元素B、Al、Ga掺杂(相应的SiNT为SiNT-B、SiNT-Al、SiNT-Ga)对于SiNTs的稳定性以及电子特性的影响进行了研究。

1 结构模型与计算方法

1.1 结构模型

在选择模型前,计算了 $n=10\sim 16$ 的锯齿型SiNTs($n, 0$)的电子特性,发现带隙在 $n=14$ 打开,这与Durgun等^[5]计算的 $n=12$ 略有差异,这是由于选择的GGA(广义梯度近似)泛函往往会低估带隙^[14,27],但这并不影响掺杂前后的对比。为了更好地比较掺杂前后的带隙变化,并控制计算原子的数量,我们选取了(14,0)的锯齿型SiNTs作为研究对象。采用周期性边界条件,在 $a\times b\times c$ 的三斜超胞中进行理论计算。如图1所示,其中SiNTs的轴向沿超胞 c 的方向无限延伸。掺杂的SiNTs选取的是 $1\times 1\times 2$ 的超胞,共112个原子,并在其中心位置进行III族元素的替位掺杂,掺杂率为0.89%。

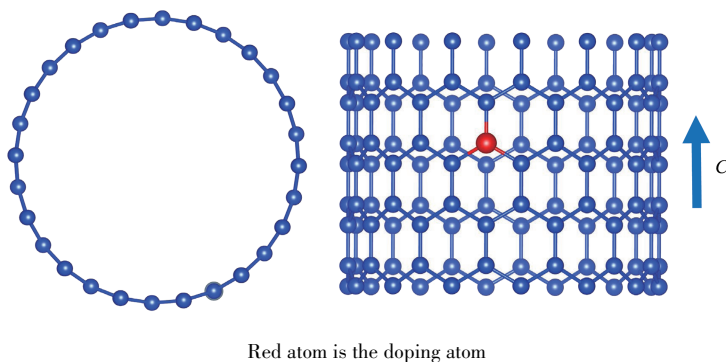


图1 单壁锯齿型(14, 0)SiNTs的结构图

Fig.1 Structure of single-wall zigzag (14, 0) SiNTs

1.2 计算方法

我们最初建立的结构往往是不稳定的,需要通过精密的结构优化计算找出其总能和应力最小的结构。因此在进行第一性原理计算之前,体系的结构优化是非常必要的。这里我们采取了BFGS算法对SiNTs进行了结构优化,其优化结束条件为每个原子的原子间自洽允许误差(SCF tolerance)等于 1×10^{-6} eV,最小应力为 $0.5\text{ eV}\cdot\text{nm}^{-1}$ 。

采用密度泛函理论(DFT)的CASTEP模块,选择超软(ultrasoft)赝势平面波和GGA下的PBE泛函进行第一性原理计算。为了保证足够的精确性,采用 $1\times 1\times 19$ Monkhorst-Pack形式的高对称特殊K点处理布里渊区的积分,每个原子的总能量自洽允许误差为 1×10^{-6} eV,平面波的截断能量为350 eV。为了防止临近纳米管的影响,在 a, b 晶格矢量方向间隔了1 nm的真空层。

2 结果与讨论

2.1 结构优化和稳定性

根据以前的SiNTs掺杂计算^[13,15-16]结果,其结构优化前后晶胞以及晶格参数变化并不大,鉴于本文计算体系规模较大,对晶胞以及晶格参数的影响更加微小。为了提升计算速度,设定优化前后晶格常数和体积不变:晶格常数 $a=b=3.045\text{ nm}$, $c=1.33\text{ nm}$,晶胞体积 $V=10.6774\text{ nm}^3$ 。如图2所示,优化后的本征SiNTs及其掺杂体系在结构上有了很大的变化,其结构不再是碳纳米管的光滑管状结构,而是形成了管壁原子凸起的褶皱型管状结构。从图3的局部

轮廓图来看,凸起的原子及其相连的3个原子形成了一种类似于金刚石的 sp^3 杂化结构,整个纳米管既有这种褶皱的结构,也保留了其最初的光滑结构。图3b和3c为本征SiNTs结构优化后的局部轮廓图,其键角分布是完全不同的。进一步引入键角和 $\sum\alpha=\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3$, $\sum\alpha$ 为X原子($X=\text{Si}$ 、 B 、 Al 、 Ga)与相邻原子 Si_a 、 Si_b 、 Si_c 的键角和,并且理想 sp^3 杂化(金刚石结构)的 $\sum\alpha=3\times109.47^\circ=328.4^\circ$,理想的 sp^2 杂化(石墨烯)的 $\sum\alpha=3\times120^\circ=360^\circ$ 。从表1中可以看到,图3b中的 $\sum\alpha=337.022^\circ$,更加接近于 sp^3 杂化;图3c中的 $\sum\alpha=358.677^\circ$,与 sp^2 杂化非常接近。由此我们可以推断,结构优化后的SiNTs的内部结构由 sp^2 和 sp^3 杂

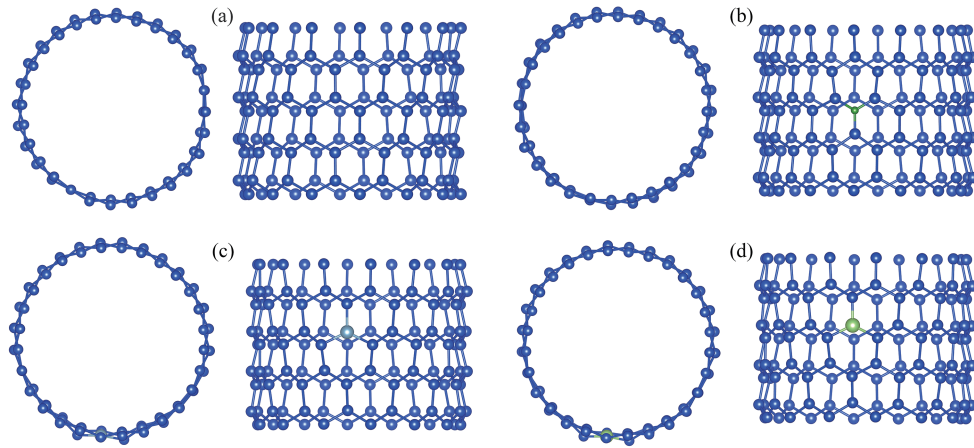


图2 结构优化后的本征(a)、B掺杂(b)、Al掺杂(c)和Ga掺杂(d)SiNTs

Fig.2 Intrinsic (a), B-doped (b), Al-doped (c) and Ga-doped (d) SiNTs with optimized structure

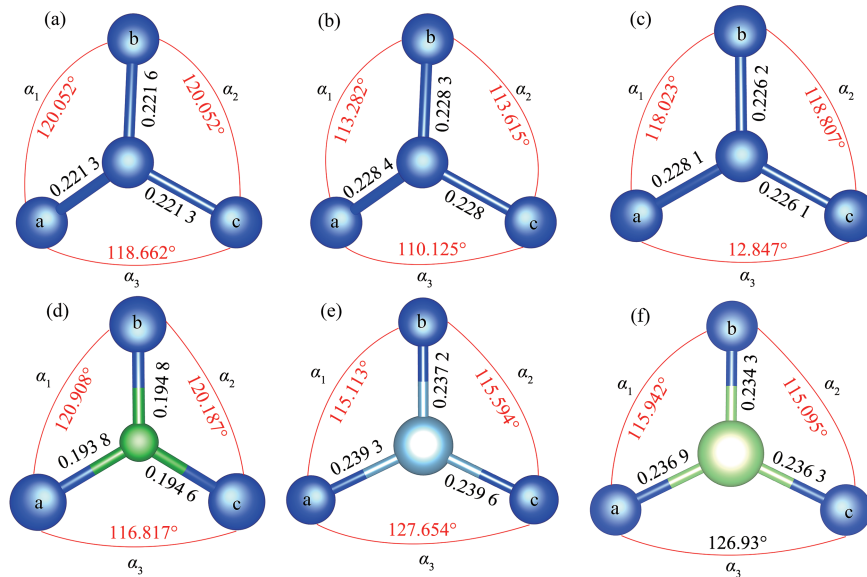


图3 本征SiNTs及其掺杂体系的局部轮廓图: (a) 本征SiNTs优化前; (b、c) 本征SiNTs优化后; (d) B掺杂; (e) Al掺杂; (f) Ga掺杂

Fig.3 Partial outline view of an intrinsic silicon nanotube and its doping system: (a) intrinsic silicon nanotube; (b, c) optimized intrinsic SiNTs; (d) B-doped; (e) Al-doped; (f) Ga-doped

表1 本征SiNTs及其掺杂体系的键角和键长

Table 1 Bond angles and lengths of intrinsic SiNTs and its doping systems

Model	$\Sigma \alpha / (^{\circ})$	$d(\text{Si-X})^* / \text{nm}$
SiNT	358.766 (Fig.3a)	0.221 4
SiNT(optimized)	337.022 (Fig.3b)	0.227 5
	358.677 (Fig.3c)	
SiNT-B	357.912 (Fig.3d)	0.194 4
SiNT-Al	358.361 (Fig.3e)	0.238 7
SiNT-Ga	357.967 (Fig.3f)	0.235 8

*X=Si, B, Al, Ga

化共同构成,是一种表面褶皱的管状结构,这与之前的研究一致^[5-6,20-21,24]。实验上也证实了SiNTs最为可能的结构便是这种褶皱型的管状结构,并且由 sp^2 杂化和 sp^3 杂化共同构成^[25-26]。

从表1可知,优化后的本征SiNTs键长有所增大,与He等^[6]计算的(8,0)锯齿型SiNTs(0.228 nm)、Zhang^[15]以及Yu^[16]计算的扶手椅型(6,6)SiNTs(0.228 nm)基本一致。Al掺杂SiNTs的Si-Al键长为0.238 7 nm,略微大于Zhang^[15]所计算的0.231 nm。根据量子化学理论^[16],铝、镓的离子半径比硅的离子半径略大,硼的离子半径略小于硅,按理掺杂原子与硅原子的键长会随着离子半径的大小而变化,这与图3以及表1所标示的一致。从图3中的键角来看,无论是本征SiNTs还是其掺杂体系,左下方与右下方($d_1 \approx d_2$)的键角更为接近,说明了 $\text{Si}_a\text{-X}$ 和 $\text{Si}_c\text{-X}$ (X=Si、B、Al、Ga)在化学性质上更为接近。SiNTs掺杂体系的 $\Sigma \alpha$ 更加接近于 360° ,说明掺杂原子与邻近硅原子形成了 sp^2 杂化。

为了分析Ⅲ族元素掺杂单壁锯齿型(14,0)SiNTs的稳定性,计算了B、Al、Ga掺杂单壁锯齿形型(14,0)SiNTs体系的形成能 E_f 。定义掺杂SiNTs体系的形成能 E_f 为

$$E_f = E_{\text{SiNT-X}} - E_{\text{SiNT}} - E_X + E_{\text{Si}} \quad (1)$$

其中, $E_{\text{SiNT-X}}$ 为Ⅲ族元素(X=B、Al、Ga)掺杂单壁锯齿(14,0)SiNTs体系的总能量; E_{SiNT} 为本征单壁锯齿型(14,0)SiNTs体系的总能量, E_X 和 E_{Si} 分别为Ⅲ族元素(B、Al、Ga)和Si原子的化学势。此式表明形成能越小其体系越稳定。

如图4所示,B、Al、Ga掺杂单壁锯齿型(14,0)SiNTs的形成能均为负值,表明掺杂SiNTs均放出了能量,由此可知B、Al、Ga掺杂SiNTs能够有效地提高SiNTs的稳定性。从形成能的大小来看, $E_{f, \text{B}} < E_{f, \text{Al}} < E_{f, \text{Ga}}$,B掺杂纳米管放出的能量最高,其次为Al,最

后为Ga。从图中也可以明显看到当Ⅲ族元素在周期表中从上到下掺杂SiNTs时,形成能不断增大,其相对稳定性不断降低。由此我们可以推论,随着掺杂元素原子序数的不断增大,其形成能不断增大,其形成的掺杂体系稳定性不断降低,但总的来说B、Al、Ga掺杂对SiNTs的稳定性都有着一定的提升。

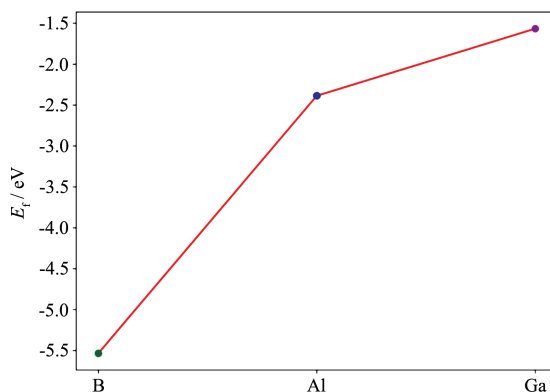


图4 B、Al和Ga掺杂单壁锯齿型(14,0)SiNTs的形成能
Fig.4 Formation energy of single-wall zigzag (14,0) silicon nanotube doped by B, Al and Ga

2.2 电子结构特性

如图5所示,我们给出了本征单壁锯齿型(14,0)SiNTs掺杂前后的能带图。从图5a可知,本征SiNTs的价带顶和导带底几乎交叠在费米能级处,但这里并未完全交叠,其带隙为0.01 eV。因为其禁带宽度很小,只需要获得极少的能量便可以跃迁到导带从而导电,可以认为是金属性质。从图5b~5d可以明显看到,相对于本征SiNTs,经过掺杂后的SiNTs,导带底均有着往高能区上升的趋势,而价带顶保持在费米能级附近,促使了(14,0)SiNTs的带隙增大,实现了SiNTs从金属性向半导体性质的转变。从Ga掺杂的纳米管能带图(图5d)中可以明显看到在价带底部(-14.6 eV)出现了杂质能级。B、Al、Ga掺杂本征(14,0)SiNTs的带隙大小随着原子序数的增加不

断减小,依次为0.191、0.158、0.149 eV。Zhang^[15]计算了Al掺杂(6,6)扶手椅型SiNTs,其带隙从0.42 eV降到了0.02 eV,出现了从半导体到金属的转变,这与我们计算的完全相反。由此可以发现,即使相同的掺杂元素,对于不同手性的SiNTs的电子结构特性影响也完全不同。也有文献报道了C、Ge对于(6,6)扶手椅型SiNTs的掺杂^[16],尽管C、Ge同为IV族元

素,其对纳米管的电子特性影响却不相同,通过C掺杂,可使SiNTs的禁带宽度减小,而Ge掺杂可使SiNTs的禁带宽度增大。然而本文计算的Ⅲ族元素B、Al、Ga对于SiNTs的电子特性影响却是一致的。

从表2可知,在导带底,Si3p、Si3s对本征SiNTs及其掺杂体系的总态密度均参与了贡献,并且掺杂体系的总态密度还取决于掺杂原子的s态电子和p

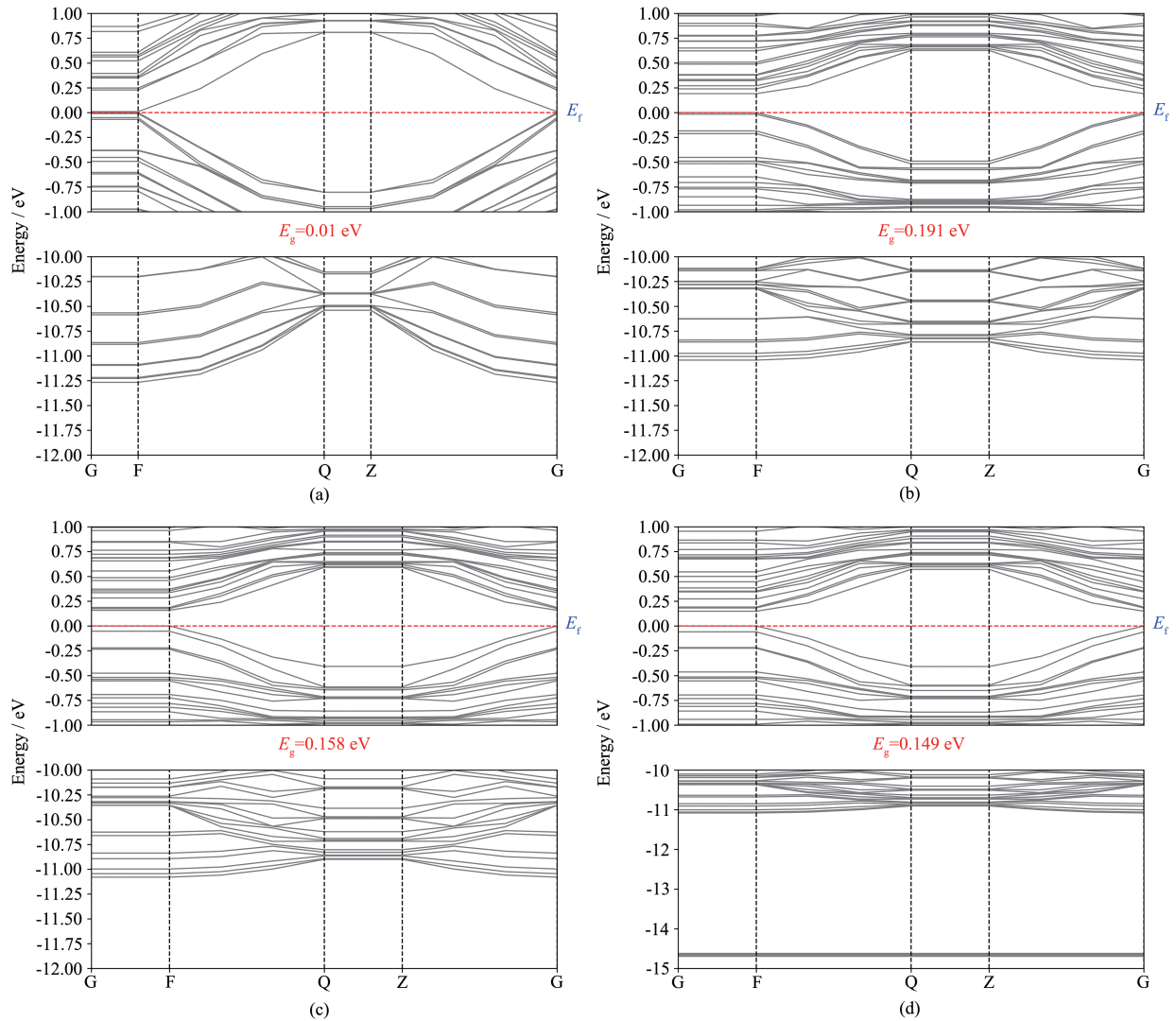


图5 本征(a)、B掺杂(b)、Al掺杂(c)和Ga掺杂(d)单壁锯齿型(14, 0)SiNTs的能带图

Fig.5 Band structures of intrinsic (a), B-doped (b), Al-doped (c) and Ga-doped (d) zigzag (14, 0) SiNTs

表2 SiNTs掺杂前后TDOS贡献分布表

Table 2 Distribution of TDOS contribution for SiNTs before and after doping

Model	Bottom of conduction band	Top of valence band	Bottom of valence band
SiNT	Si3p, Si3s	Si3p	Si3s, Si3p
SiNT-B	Si3p, Si3s, B2p, B2s	Si3p, B2p	Si3p, Si3s, B2s, B2p
SiNT-Al	Si3p, Si3s, Al3p, Al3s	Si3p, Al3p	Si3p, Si3s, Al3s
SiNT-Ga	Si3s, Si3p, Ga4s, Ga4p	Si3p, Ga4p	Si3p, Si3s, Ga4s

态电子。通过对图6的对比发现,在贡献程度上B、Al的 s 态电子比 p 态电子贡献更大,而Ga的 p 态电子贡献略多于 s 态电子。在价带顶, Si3 p 均参与了本征及其掺杂体系总态密度的贡献,此外,掺杂元素的 p

态电子对各自体系总态密度也有贡献。在价带底, Si3 p 、Si3 s 均参与了对本征 SiNTs 及其掺杂体系的总态密度贡献,掺杂体系总态密度还取决于其掺杂元素的 s 态电子,唯一不同的是 SiNT-B 还由少量的

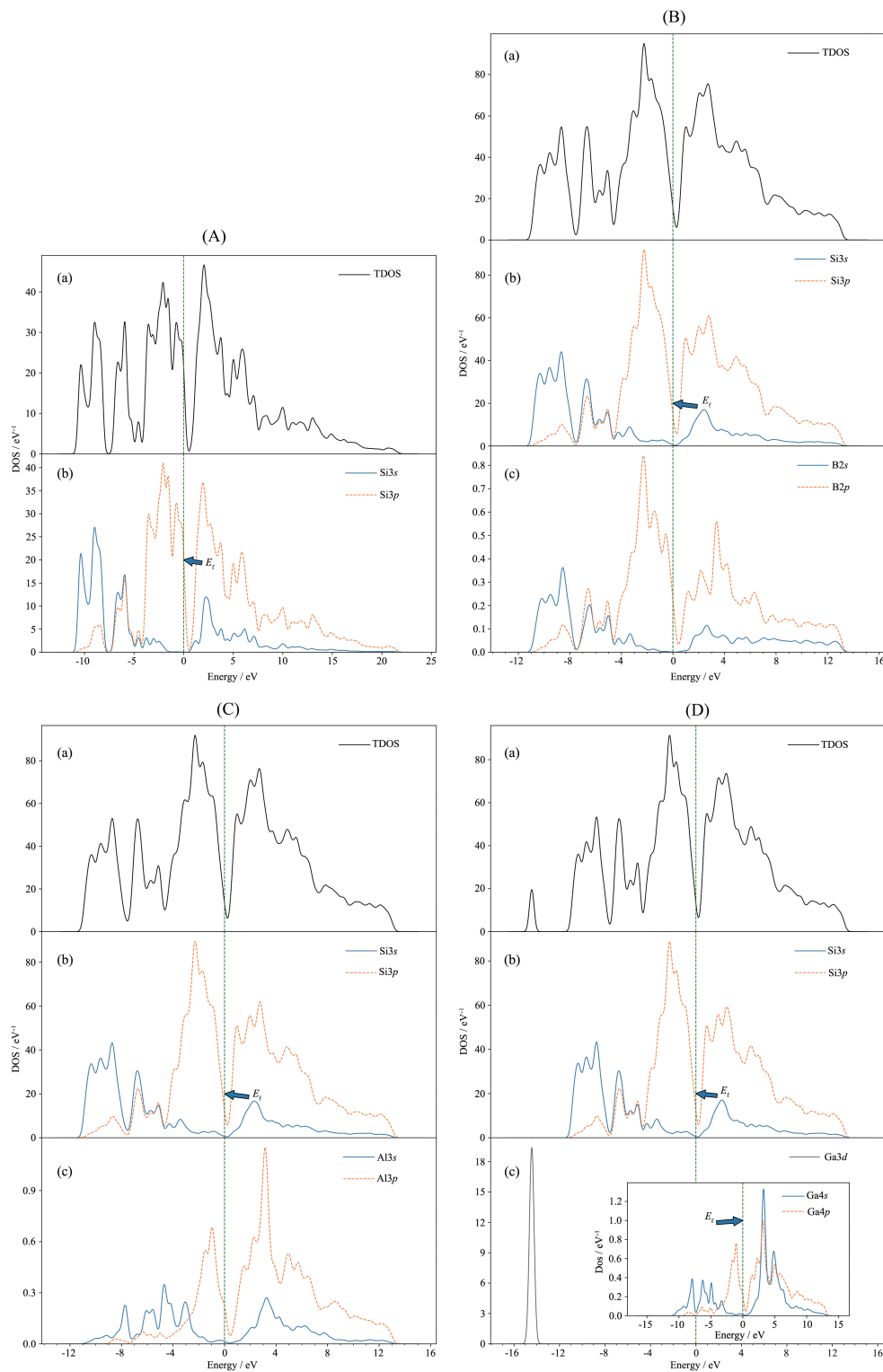


图6 本征 (A)、B掺杂 (B)、Al掺杂 (C)和Ga掺杂 (D) SiNTs的总态密度图和分态密度图

Fig.6 TDOS and PDOS of intrinsic (A), B-doped (B), Al-doped (C) and Ga-doped (D) SiNTs

B2p 构成。从图6还可以明显看到, SiNT-Ga 的总态密度在-15.5~13.5 eV 出现了杂质态, 其完全由 Ga3d 态电子贡献。

B、Al、Ga 替代硅的掺杂属于非等电荷掺杂, 会产生多余的空穴参与导电, 空穴浓度高于自由电子的浓度, 其掺杂可以认为是一种 P 型掺杂。相对于 Si 元素而言, III 族元素 B、Al、Ga 没有多余的 *p* 态电子, 虽然并没有像 N 型掺杂^[13]那样在费米能级附近形成施主杂质能级, 但由于 Ga3d 态电子的贡献, SiNT-Ga 产生了杂质能级, 与图 5d 的能带图一致。由于其远离费米能级, 又被称为深能级杂质, 对于整个体系的带隙以及导电性并没有影响。在导带区域, Si3p 态电子、Si3s 态电子、X3p 态电子以及少量的 X3s 态电子(X=B、Al、Ga)相互作用, 驱动导带底的电子向高能区偏移, 而价带顶的电子位置基本不变, 从而形成图 5 所示的 B、Al、Ga 掺杂单壁锯齿型 (14,0)SiNTs 最小禁带宽度变宽的现象。

2.3 介电函数与光吸收特性

单壁锯齿型 (14,0)SiNTs 的光学性质取决于它的电子结构, 可以由介电函数以及与之相关的反射系数和吸收系数等来表征。光在介质中传播, 当需要考虑吸收的影响时, 介电函数 $\varepsilon(\omega)$ ^[13,22] 需要用复数来表示, 为此引入以下公式:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (2)$$

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2(\omega) - k^2(\omega) \quad (3)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2n(\omega)k(\omega) \quad (4)$$

图 7~9 分别给出了 B、Al、Ga 掺杂前后单壁锯齿型 (14,0)SiNTs 的复介电函数实部图、虚部图以及吸收光谱图。从复介电函数实部图(图 7)可看出本征 SiNTs 的静态介电函数为 4.49, 其复介电函数实部在 0.85 eV 左右出现一个最大介电峰, 随着能量的增加, 在 3.35 eV 左右出现一个局域最大介电峰, 并且实部介电峰在 10 eV 后逐渐趋于平稳。从图中可知 B、Al、Ga 掺杂的 SiNTs 的复介电函数实部几乎重合在一条线上, 对 SiNTs 的光学性质表现出了强烈的一致性, 其原因是 B、Al、Ga 的核外价电子都是 *s* 和 *p* 态电子且核外价电子数目相同, 在化学性质方面有着很大的相似性。同时随着 B、Al、Ga 杂质的引入, SiNTs 的静态介电常数分别变为 6.94、6.96、7.02, 相对于本征 SiNTs, B、Al、Ga 掺杂 SiNTs 的静态介电常数有所增大。半导体材料的介电关系^[23]为: $\varepsilon(0) \approx 1 + (\hbar w' / E_g)^2$, 其中 w' 为等离子频率, E_g 为半导体的禁带宽度。随着 Ga、Al、B 掺杂 SiNTs 静态介电函数不断

地增加($\varepsilon_B(0) < \varepsilon_{Al}(0) < \varepsilon_{Ga}(0)$), 其掺杂 SiNTs 的禁带宽度依次减小($E_{g,B} > E_{g,Al} > E_{g,Ga}$), 这一现象与图 5 的能带图完全吻合。

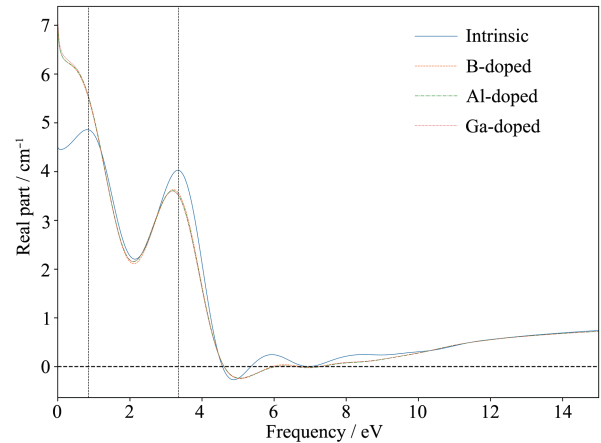


图 7 掺杂前后 (14,0)SiNTs 的复介电函数实部

Fig.7 Real part of complex dielectric function of (14,0) SiNTs before and after doping

图 8 为 B、Al、Ga 掺杂前后 (14,0)SiNTs 的复介电函数虚部图, 本征 SiNTs 在 1.55 eV 附近出现了一个较大的吸收峰, 随着能量的增大, 在 4.05 eV 出现了一个尖锐的最大介电吸收峰。从图中可知, B、Al、Ga 掺杂 SiNTs 的复介电函数虚部走势在图中几乎重合为一条线, 其原因与上面提到的一致。同时随着 B、Al、Ga 杂质的引入, 掺杂 SiNTs 的 2 个吸收峰峰明显增大, 相应的带宽也有所宽化, 掺杂 SiNTs 的 2 个吸收峰向低能区方向略微偏移, 从而出现了介电峰红移的现象。

图 9 给出了 B、Al、Ga 掺杂前后单壁锯齿型 (14,0)SiNTs 的吸收光谱图。本征 SiNTs 的吸收光谱在

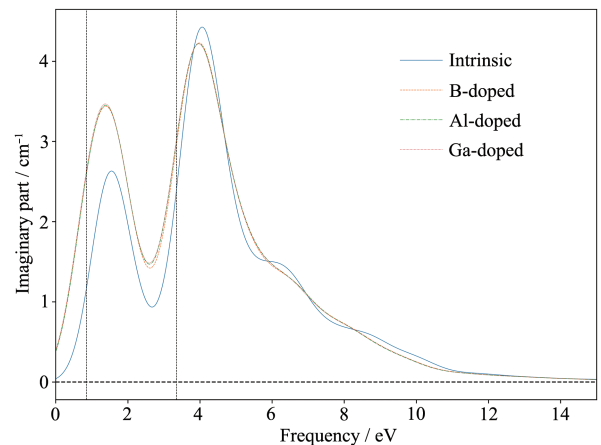


图 8 掺杂前后 (14,0)SiNTs 的复介电函数虚部

Fig.8 Imaginary part of complex dielectric function of (14,0) SiNTs before and after doping

1~3.26 eV 的红外和可见光波段出现较强烈的光吸收峰,其光吸收系数均在 1×10^4 以上;3.26~12.4 eV 的紫外光波段出现非常强烈的光吸收峰,其平均光吸收系数均在 5×10^4 以上。这表明单壁锯齿型(14, 0)SiNTs 对于紫外光有着很强的吸收特性,并且对于红外和可见光波段也有着良好的吸收特性,可以作为紫外光探测器和太阳能电池的优良材料。B、Al、Ga 掺杂 SiNTs 的吸收系数走势依旧重合为一条线。掺杂的 SiNTs 在红外和可见光波段吸收带宽有所增加,且峰值明显增大,表明引入 B、Al、Ga 杂质能够有效提高 SiNTs 的红外和可见光吸收特性;在紫外光波段,其吸收系数有增有减,总体保持了本征(14, 0)SiNTs 的高吸收特性。

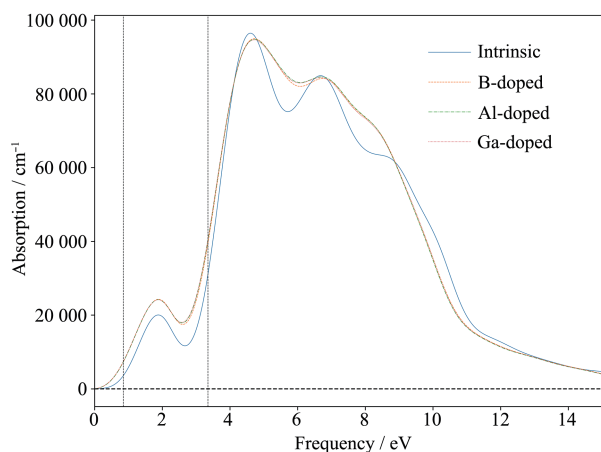


图9 掺杂前后(14, 0)SiNTs 的吸收光谱

Fig.9 Absorption spectra of (14,0) SiNTs before and after doping

3 结论

利用基于密度泛函理论的第一性原理的方法,计算了本征单壁锯齿型(14, 0)SiNTs 及其 B、Al、Ga 掺杂体系的形成能、能带结构、态密度和光学性质,结果表明:

(1) SiNTs 的管状结构更加倾向于 sp^3 杂化,其稳定结构为 sp^2 和 sp^3 杂化共同构成的褶皱型纳米管结构。

(2) 通过对 B、Al、Ga 掺杂本征单壁锯齿型(14, 0)SiNTs 形成能的对比,我们发现 B、Al、Ga 掺杂均可以提高 SiNTs 的稳定性,随着掺杂元素原子序数的增大,其掺杂体系的稳定性不断降低,稳定性由强到弱依次为 SiNT-B、SiNT-Al、SiNT-Ga、SiNT。

(3) 本征单壁锯齿型(14, 0)SiNTs 是一种窄带隙材料,其带隙为 0.01 eV,可以认为具有金属性质;同

时随着 B、Al、Ga 杂质的引入, SiNTs 的带隙变宽,实现了 SiNTs 从金属性向半导体性质的转变,并且带隙随着掺杂元素原子序数的增大而减小。

(4) B、Al、Ga 在周期表中同为第Ⅲ族元素,有着非常相似的化学性质。我们发现它们的介电函数的实部和虚部以及吸收系数在图中几乎重合在一起,表明了 B、Al、Ga 掺杂对单壁锯齿型(14, 0)SiNTs 的光学性质有着完全相同的影响。B、Al、Ga 掺杂单壁锯齿型(14, 0)SiNTs 对于紫外光有着很强的吸收特性,并且对于红外和可见光吸收有着明显的提升,可以作为紫外光探测器和太阳能电池的优良材料。

参考文献:

- [1] Iijima S. *Nature*, **1991**, **354**(6348):56-58
- [2] Iijima S, Ichihashi T. *Nature*, **1993**, **363**(6430):603-605
- [3] Bethune D S, Kiang C H, De Vries M S, et al. *Nature*, **1993**, **363**(6430):605-607
- [4] Zhang R Q, Lee S T, Law C K, et al. *Chem. Phys. Lett.*, **2002**, **364**(3/4):251-258
- [5] Durgun E, Tongay S, Ciraci S. *Phys. Rev. B*, **2005**, **72**(7):075420
- [6] He T, Zhao M, Li W, et al. *Nanotechnology*, **2008**, **19**(20):205707
- [7] Seifert G, Köhler T, Urbassek H M, et al. *Phys. Rev. B*, **2001**, **63**(19):193409
- [8] Singh A K, Kumar V, Briere T M, et al. *Nano Lett.*, **2002**, **2**(11):1243-1248
- [9] Zhao M, Zhang R Q, Xia Y. *J. Appl. Phys.*, **2007**, **102**(2):024313
- [10] Zhao M, Zhang R Q, Xia Y, et al. *J. Phys. Chem. C*, **2007**, **111**(3):1234-1238
- [11] Dumitrică T, Hua M, Yakobson B I. *Phys. Rev. B*, **2004**, **70**(24):241303
- [12] Singh A K, Briere T M, Kumar V, et al. *Phys. Rev. Lett.*, **2003**, **91**(14):146802
- [13] YU Zhi-Qiang(余志强), ZHANG Chang-Hua(张昌华), LANG Jian-Xun(郎建勋). *Acta Physica Sinica*(物理学报), **2014**, **63**(6):067102
- [14] Paier J, Marsman M, Hummer K, et al. *J. Chem. Phys.*, **2006**, **124**(15):154709
- [15] ZHANG Chang-Hua(张昌华), YU Zhi-Qiang(余志强), LANG Jian-Xun(郎建勋), et al. *Materials Reports*(材料导报), **2016**, **30**(22):147-151
- [16] YU Zhi-Qiang(余志强), ZHANG Chang-Hua(张昌华), LI Shi-Dong(李时东), et al. *Journal of Inorganic Materials*(无

- 机材料学报), **2015**,**30**(3):233-239
- [17]Wang T, Lu J, Zhu H, et al. *Superlattices Microstruct.*, **2017**, **109**:457-462
- [18]Liu D H, Yao C P, Yang M, et al. *Superlattices Microstruct.*, **2018**,**123**:20-29
- [19]Bai J, Zeng X C, Tanaka H, et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **2004**,**101**(9):2664-2668
- [20]Barnard A S, Russo S P. *J. Phys. Chem. B*, **2003**,**107**(31): 7577-7581
- [21]Zhang M, Kan Y H, Zang Q J, et al. *Chem. Phys. Lett.*, **2003**, **379**(1/2):81-86
- [22]HUANG Kun(黄昆), HAN Ru-Qi(韩汝琦). *Solid State Physics* (固体物理学). Beijing: People Education Press, **1979**.
- [23]Penn D R. *Phys. Rev.*, **1962**,**128**(5):2093
- [24]Zhang R Q, Lee H L, Li W K, et al. *J. Phys. Chem. B*, **2005**, **109**(18):8605-8612
- [25]Castrucci P, Scarselli M, De Crescenzi M, et al. *Thin Solid Films*, **2006**,**508**(1/2):226-230
- [26]De Crescenzi M, Castrucci P, Scarselli M, et al. *Appl. Phys. Lett.*, **2005**,**86**(23):231901
- [27]Ibragimova R, Ganchenkova M, Karazhanov S, et al. *Philos. Mag.*, **2018**,**98**(8):710-726