

First-Principles Study of Electronic Structure and Optical Properties of Ca-Doped SnS₂

Na Wang^{1,2*}, Hongfei Liu¹

¹School of Science, Tianjin Chengjian University, Tianjin

²Department of Applied Physics, Faculty of Science, Tianjin University, Tianjin

Email: na_wang209@163.com

Received: Nov. 23rd, 2018; accepted: Dec. 19th, 2018; published: Dec. 26th, 2018

Abstract

The electronic structure and optical properties of Ca-doped SnS₂ were investigated by first principles calculations based on density functional theory. The structural properties calculated with the optB86b + vdWDF functional are in good agreement with experimental results. Thus, consideration of the vdW interactions is important for theoretical investigation of SnS₂. For Ca doped single-layer SnS₂, the occurrence of unoccupied defect states, located above the valence band maximum, indicates p-type doping for Ca doped SnS₂. The calculated optical absorption spectra show that absorption edges of the doped systems exhibit red shift with respect to pure SnS₂. It indicates that low valence metal Ca doping is beneficial to improve the optical absorption in the visible light range. The above results can provide reliable guidance for its experimental application in optoelectronics.

Keywords

First-Principles Calculation, SnS₂, Electronic Structure, Optical Absorption

Ca掺杂SnS₂电子结构和光学性质的第一性原理研究

王娜^{1,2*}, 刘洪飞¹

¹天津城建大学, 理学院, 天津

²天津大学, 应用物理系, 理学院, 天津

Email: na_wang209@163.com

*通讯作者。

收稿日期: 2018年11月23日; 录用日期: 2018年12月19日; 发布日期: 2018年12月26日

摘要

本论文采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 研究了Ca掺杂SnS₂材料的电子结构和光吸收性质。计算结果表明, 采用optB86b + vdWDF交换关联泛函计算得到的晶格结构与实验结果符合的很好, 说明包含范德瓦尔斯作用的vdW-DF泛函, 能够更好的描述层状SnS₂材料的物理性质。态密度分析表明, Ca掺杂在费米能级之上引入了未占据的杂质态, 材料表现为p型半导体。光吸收性质的计算结果表明, 掺杂后体系在带边附近吸收系数大于未掺杂体系, 表明采用低价金属Ca掺杂的方法, 能够有效提高SnS₂材料在可见光区的光吸收能力, 以上结果为层状SnS₂材料在光电领域的应用提供可靠的理论基础。

关键词

第一性原理计算, SnS₂, 电子结构, 光吸收

Copyright © 2018 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

利用太阳光的半导体光催化技术不仅可以实现水分解制氢, 还能降解水中的有机污染物, 是人类社会应对能源危机、解决环境问题、寻求可持续发展的重要对策。半导体金属硫化物由于具有较窄的禁带宽度, 能够吸收可见光, 因而在可见光催化领域具有广阔的应用前景。CdS, In₂S₃, ZnIn₂S₄等一些硫化物的光催化性能被陆续报道[1] [2] [3], 然而 Cd²⁺离子的毒性和 In 的稀缺性限制了这几种硫化物的应用。SnS₂是具有类似 CdI₂的层状结构的硫化物半导体材料, 理论上可以被波长小于 563.6 nm 的可见光激发, 驱动光催化反应[4] [5] [6]。另外, 它具有无毒、廉价、在酸性和中性水溶液中化学性质稳定等优点, 很有潜力成为可以替代传统紫外光催化剂的可见光光催化剂, 是光催化领域研究的热点材料之一。为了更高效地利用绝大部分可见光甚至整个太阳光波段所对应的能量, 提高 SnS₂光催化本领, 研究人员把工作重点又聚集到对 SnS₂进行改性研究上。

Alqarni 等人[7]采用熔盐辅助固相反应法制备了六方相 Fe 掺杂 SnS₂纳米晶, 并对其光学性质进行了测量分析, 结果表明 Fe 掺杂能够有效提高 SnS₂对整个太阳光能量波段的响应。Wahnón 等人[8]采用第一性原理计算了 V 替位掺杂 SnS₂体系的电子结构和光学性质。计算结果显示, V 掺杂 SnS₂可以同时利用紫外-可见-红外能量范围内的太阳光, 极大的拓展了 SnS₂对太阳光谱的响应范围。Xia 等人[9]通过理论计算发现, Ti 掺杂 SnS₂体系带隙值, 随 Ti 掺杂浓度的增加单调减小。当 Ti 的有效掺杂浓度达到 6.25% 时, 体系所对应带隙值已经成功降到 1.27 eV, 表明其能够非常高效地吸收并利用太阳能中的可见光。然而, Kim 等人[10]对 Ti 掺杂 SnS₂光学性质的实验研究却得到了不同的结果, 相对于纯 SnS₂, Ti 掺杂 SnS₂的吸收边发生蓝移, 光学带隙增大。Etefagh 等人[11]以地球上储量丰富且原子半径和 Sn 接近的 Zn 作为掺杂元素, 制备了 Zn 掺杂 SnS₂薄膜并研究了其对可见光的响应情况。光谱分析结果表明, 所有掺杂体系的光学带隙都小于未掺杂 SnS₂体系的带隙, 但随着 Zn 掺杂浓度的增加, 带隙值并不是单调减小, 在 Zn 掺杂浓度为 5%时带隙值达到最小。Sun 等人[12]通过第一性原理的研究也表明, 相对于纯 SnS₂, Zn 掺杂

SnS₂的吸收边发生红移,且体系光催化能力增强。所以,研究不同的低价金属阳离子掺杂 SnS₂ 的光学性质是十分有必要的。此外, Peng 等人[13]还指出半导体体系中的空位掺杂,与缺陷铁磁性之间存在关系。因而,在研究 SnS₂ 体系时,也应该考虑空位掺杂导致的磁性对性质的影响。另外,还有实验证明单层 SnS₂ 体系的光催化本领要远远优于其所对应的体材料[6]。所以在本文中,我们采用基于密度泛函理论的第一性原理方法,研究了 Ca 掺杂单层 SnS₂ 的电子和光学性质,为实验上设计具有高效光催化活性的 SnS₂ 材料提供了一定的理论依据。

2. 计算方法和模型

本文所有的计算都是在基于密度泛函理论赝势平面波的 VASP 程序中进行的[14][15][16][17]。电子与离子之间的相互作用通过 PAW 方法来描述,采用广义梯度近似(PBE)描述电子与电子之间的交换关联项。计算中所涉及到原子的价电子组态选择为: Sn:4d¹⁰5s²5p², S:3s²3p⁴, Ca:3s²3p⁶4s₂。平面波的截断能量为 500 eV,采用 3 × 3 × 3 的 Monkhorst-Pack 网格对第一布里渊区的进行积分,自洽计算的收敛精度为 10⁻⁵ eV·atom⁻¹。为了模拟掺杂 SnS₂ 体系,我们构建了 4 × 4 × 1 的 SnS₂ 单层的超晶胞模型,为了消除 SnS₂ 单层之间的相互影响,我们在两个 SnS₂ 单层之间加入了厚度为 1.48 nm 的真空层,使得 SnS₂ 单层之间的相互作用对于总能的影响小于 10⁻⁴ eV·supercell⁻¹。为了构建掺杂体系模型,将 SnS₂ 单层中的一个 Sn 原子替换为 Ca 原子,掺杂浓度为 6.25%,掺杂的位置如图 1 所示。进行性质计算之前,先对超胞的形状和体积以及内部坐标进行优化,收敛标准为原子受力小于 0.01 eV/Å。此外,考虑到在包含着弱相互作用的材料中,范德瓦尔斯相互作用对于体系结构的影响也很重要[18]。因此,我们采用了 optB86b + vdWDF 的交换关联泛函形式来描述体相 SnS₂ 材料中的范德瓦尔斯相互作用[19]。

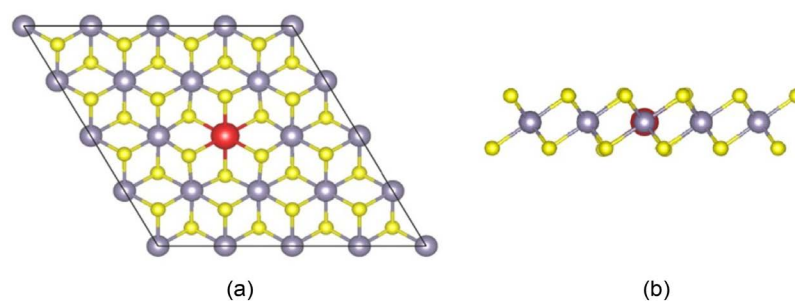


Figure 1. The top view (a) and side view (b) of optimized Ca-doped single-layer SnS₂. Yellow, dark and red spheres represent the S, Sn and Ca atoms, respectively
图 1. 优化之后的 Ca 掺杂 SnS₂ 超胞的俯视图(a)和侧视图(b),其中黄色、铅色和红色球分别代表的是 S、Sn 和 Ca 原子

介电函数是反映材料光谱特性的有效指标之一,用来描述半导体材料电磁辐射的线性响应属性。在密度泛函理论计算中,介电函数的虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 是通过计算从占据态到空态的电子跃迁积分得到的。然后再通过 Kramer-Kronig 变换[20],得到介电函数的实部 $\epsilon_1(\omega)$ 。因此,介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 对于分析电子跃迁规律和光吸收特性有重要意义。

3. 计算结果与讨论

为了测试计算参数对于计算结果的影响,我们采用不同的方法优化了体相 SnS₂ 的晶体结构,优化后的晶格常数、Sn-S 键长和带隙宽度 E_g 如表 1 所示。从表中可以看出,我们采用非局域 vdW-DF 方法计算得到的晶格常数与实验值符合的很好[21][22][23],并且优于 PBE 和 PBE + U 计算得到的结果[24]。这说明对于 SnS₂ 这样的层状化合物,引入包含范德瓦尔斯作用的 vdW-DF 方法对于更好的描述体系的晶体结

构是十分必要的。而且, 相比于采用不同方法都能够给出与实验符合较好的晶格常数 a , 引入范德瓦尔斯作用之后, 计算得到的晶格常数 c 与实验结果更为符合, 远优于采用其它方法的结果。这主要是由于 SnS_2 单层是沿着 c 轴方向进行堆叠的, 所以范德瓦尔斯作用主要体现在 c 轴方向上, 这种现象在其他层状结构材料中也有报道[25] [26]。

Table 1. Calculated structural parameters a and c , the bond lengths $d_{\text{Sn-S}}$ and band gaps E_g for bulk SnS_2 , compared to the experimental values and other calculated results

表 1. 采用不同方法计算得到的体相 SnS_2 的晶格常数、Sn-S 键长和带隙宽度。作为比较, 实验结果和其他计算值也分别列出

	a (Å)	c (Å)	$d_{\text{Sn-S}}$ (Å)	E_g (eV)
实验值[21] [22] [23]	3.647	5.893	2.572	2.000
本文采用的方法	3.682	5.882	2.592	1.379
PBE	3.703	6.509	2.599	1.520
其他计算(PBE + U) [24]	3.524	6.352	2.468	2.204

计算得到的带隙宽度和 PBE 计算相符, 都小于实验值, 这是基于局域密度近似的第一性原理计算中存在的一个普遍的问题。虽然, PBE + U 计算能够很好的改善计算带隙宽度偏小的问题, 但较小的带隙并不会影响我们分析材料的电子结构以及价带和导带的组成, 为了保证计算的一致性, 我们仍采用与之前相同的方法进行后续的计算。

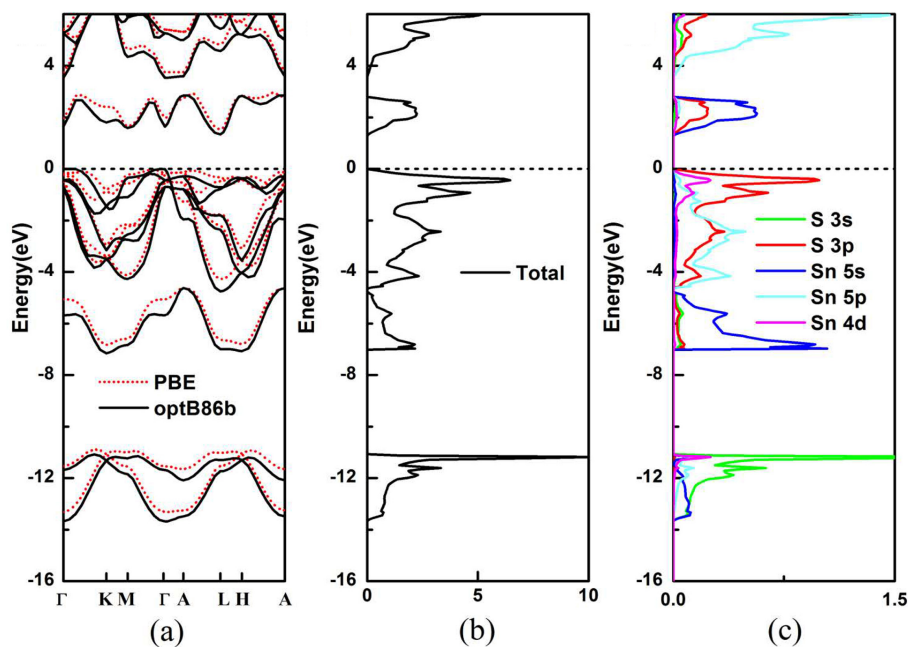


Figure 2. The PBE and optB86b calculated band structures (a) of SnS_2 unit cell. The optB86b calculated total DOS (b) and partial DOS (c) of SnS_2 unit cell. The energy zero represents the fermi level

图 2. 计算得到的体相 SnS_2 的能带结构(a), 以及计算得到的总态密度(b)和分波态密度(c), 费米能级所在位置设为零

为了进一步了解体系的电子结构, 图 2 给出了计算得到的体相 SnS_2 的能带结构、总态密度和分波态密度。从能带图中可以看出(图 2(a)), 体相的 SnS_2 属于间接带隙半导体材料, 带隙宽度为 1.379 eV, 与

其他计算得到的结果相符[24]。通过比较 Sn 和 S 的分波态密度分布, 我们可以得到体系原子之间的成键机理。从图中可以看出, 体相 SnS₂ 的带隙附近的能态主要来自于 S 3p 轨道和 Sn 5s、5p 轨道的贡献。其中, 价带顶的态密度主要来自于 S 3p 轨道和少量的 Sn 4d 轨道的贡献, 而导带底的态密度主要来自于 Sn 5s 轨道和 S 3p 轨道的贡献。此外, S 3s 轨道和 Sn 5s 轨道主要集中在 -13 eV ~ -11 eV 和 -4.5 eV ~ -7.0 eV 附近的深能级区域, 对于材料的光学性质影响比较小; Sn 5p 轨道主要分布在 -1.5 eV ~ -4.5 eV 的价带中部和 4 eV 以上的导带部分, 与之前的计算结果相一致[27], 这也表明我们采用的计算方法是可靠的。

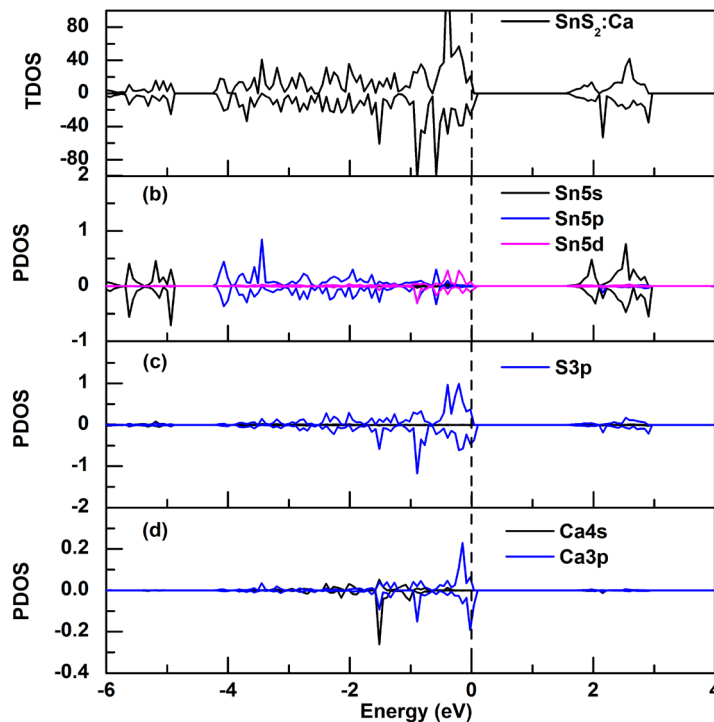


Figure 3. The calculated total DOS and partial DOS for Ca doping in SnS₂. The energy zero represents the fermi level

图 3. 计算得到的 Ca 掺杂单层 SnS₂ 的总态密及分波态密度。费米能级所在位置设为零

接下来, 我们研究低价金属离子掺杂对于单层 SnS₂ 材料性质的影响。计算得到的 Ca 掺杂 SnS₂ 单层的总态密度和分波态密度分布如图 3 所示。从图 3(a)中可以看出, Ca 掺杂体系的费米能级进入到了价带当中, 掺杂体系表现出 p 型半导体的特点, 所以 Ca 属于受主杂质。此外, 自旋向上和自旋向下的态密度不再是对称分布, 这与计算的到的 Ca 掺杂体系的总磁矩不再为零(2 μB)相对应。通过比较 Sn、S 和 Ca 的分波态密度可以看出, 费米能级处的能态主要来自于 S 3p 轨道的贡献, 同时包含了部分和 Ca 3p 轨道和 Sn 5d 轨道贡献; 导带底仍然是由自于 Sn 5s 轨道和 S 3p 轨道组成, 而 Ca 掺杂对于导带几乎没有产生任何的影响。

半导体材料的吸收系数 $\alpha(\omega)$ 可以通过公式: $\alpha(\omega) = \sqrt{2}\omega \left[\sqrt{\epsilon_1(\omega)^2 + \epsilon_2(\omega)^2} - \epsilon_1(\omega) \right]^{1/2}$ 求得[28]。我们计算得到的 Ca 掺杂 SnS₂ 的吸收系数 $\alpha(\omega)$ 如图 4 所示, 其中吸收系数的单位为 10^5 cm^{-1} 。作为参考, 未掺杂单层 SnS₂ 的吸收系数谱也一并给出。从图中我们可以看出, 对于未掺杂和掺杂体系, 不同方向上的吸收系数存在较大差别。并且, 无论是未掺杂 SnS₂ 还是 Ca 掺杂 SnS₂ 体系, 在垂直于 z 轴平面的光吸收均要比其在沿 z 轴方向的光吸收要强。因此, 要想可以更加合理高效的利用太阳光能量, 在实际的实验

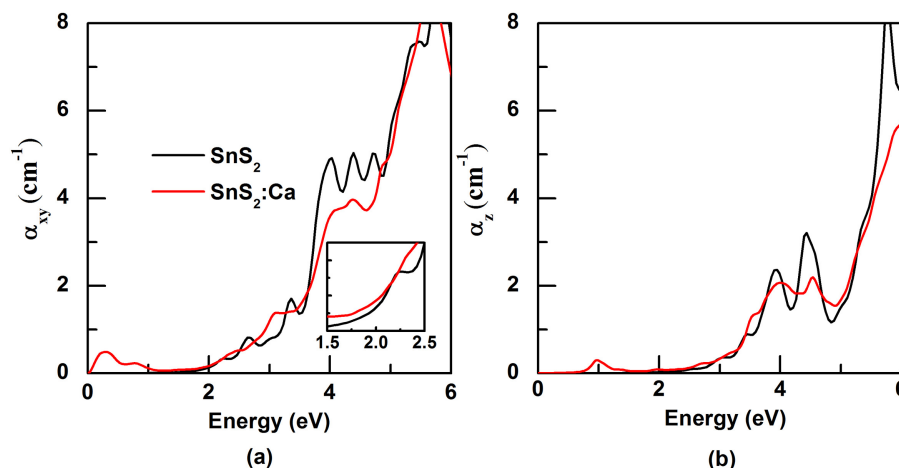


Figure 4. The optical absorption coefficients as a function of photon energy along the directions of perpendicular (a) and parallel (b) to the z axis for Ca doping in single-layer SnS₂
图 4. 计算得到的未掺杂和 Ca 掺杂单层 SnS₂ 的吸收系数: 垂直于 z 轴方向(a)和平行于 z 轴方向(b)

过程中我们就应该尽可能沿着垂直于 z 轴的方向上生长 SnS₂ 材料。而通过对比掺杂体系的分波态密度分布可知, 出现在 0~2 eV 范围内的吸收峰, 对应于掺杂之后, 费米能级之上未占据的 S 3p 能级与价带之间的跃迁。此外, 从图 4(a)的插图中我们也可以看出, 对于带边附近来说, Ca 掺杂体系的吸收系数比未掺杂体系要强。这表明采用低价金属 Ca 掺杂的方法, 能够有效提高 SnS₂ 材料在可见光区的光吸收能力, 以上结果为 SnS₂ 材料在光电收领域的应用提供了一定的理论基础。

4. 结论

我们采用第一性原理计算方法, 研究了 Ca 掺杂 SnS₂ 材料的电子结构和光吸收性质。计算结果表明, 采用 optB86b + vdWDF 交换关联泛函计算得到的晶格结构与实验结果符合的很好, 且优于其它计算结果, 说明包含范德瓦尔斯作用的 vdW-DF 泛函能够更好的描述层状 SnS₂ 材料的物理性质。态密度分析表明, Ca 掺杂在费米能级之上引入了未占据的杂质态, 材料表现为 p 型半导体。光吸收性质的计算结果表明, 掺杂后体系在带边附近吸收系数大于未掺杂体系, 表明采用低价金属 Ca 掺杂的方法, 能够有效提高 SnS₂ 材料在可见光区的光吸收能力, 以上结果为层状 SnS₂ 材料在光电领域的应用提供可靠的理论基础。

基金项目

本论文感谢国家自然科学基金(11747158)和国家自然科学基金(11547123)的资助。

参考文献

- [1] Ma, Y.L., Zhao, Z.K., Shen, Z.R., Cai, Q., Ji, H.M. and Meng, L.C. (2017) Hydrothermal Carbonation Carbon-Coated CdS Nanocomposite with Enhanced Photocatalytic Activity and Stability. *Catalysts*, **7**, 194. <https://doi.org/10.3390/catal7070194>
- [2] Zhou, J., Tian, G.H., Chen, Y.J., Shi, Y.H., Tian, C.G., Pan, K. and Fu, H.G. (2014) Growth Rate Controlled Synthesis of Hierarchical Bi₂S₃/In₂S₃ Core/Shell Microspheres with Enhanced Photocatalytic Activity. *Scientific Reports*, **4**, 4027. <https://doi.org/10.1038/srep04027>
- [3] Yang, W., Chen, D.Z., Quan, H.Y., Wu, S.L., Luo, X.B. and Guo, L. (2016) Enhanced Photocatalytic Properties of ZnFe₂O₄-Doped ZnIn₂S₄ Heterostructure under Visible Light Irradiation. *RSC Advances*, **6**, 83012-83019. <https://doi.org/10.1039/C6RA14847F>
- [4] Li, X., Zhu, J. and Li, H.X. (2012) Comparative Study on the Mechanism in Photocatalytic Degradation of Differ-

- ent-Type Organic Dyes on SnS₂ and CdS. *Applied Catalysis B: Environmental*, **123-124**, 174-181. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2012.04.009>
- [5] Fong, C.Y. and Cohen, M.L. (1972) Electronic Energy-Band Structure of SnS₂ and SnSe₂. *Physical Review B*, **5**, 3095-3101. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.5.3095>
- [6] Sun, Y.F., Cheng, H., Gao, S., Sun, Z.H., Liu, Q.H., Liu, Q., Lei, F.C., Yao, T., He, J.F., Wei, S.Q. and Xie, Y. (2012) Freestanding Tin Disulfide Single-Layers Realizing Efficient Visible-Light Water Splitting. *Angewandte Chemie-International Edition*, **51**, 8727-8731. <https://doi.org/10.1002/anie.201204675>
- [7] Alqarni, A.S. and Yassin, O.A. (2016) Structural and Optical Properties of Fe-doped SnS₂ Nanoflakes Prepared by Molten Salt Solid State Reaction. *Materials Science in Semiconductor Processing*, **42**, 390-396. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2015.11.009>
- [8] Wahnón, P., Conesa, J.C., Palacios, P., Lucena, R., Aguilera, I., Seminovski, Y. and Fresno, F. (2011) V-Doped SnS₂: A New Intermediate Band Material for a Better Use of the Solar Spectrum. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **13**, 20401-20407. <https://doi.org/10.1039/c1cp22664a>
- [9] Xia, C.X., An, J., Wang, T.X., Wei, S.Y. and Jia, Y. (2014) Sn_{1-x}Ti_xS₂ Ternary Alloys: A New Visible Optical Material. *Acta Materialia*, **72**, 223-228. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.03.042>
- [10] Kim, K.M., Kwak, B.S., Kang, S. and Kang, M. (2014) Synthesis of Submicron Hexagonal Plate-Type SnS₂ and Band gap-Tuned Sn_{1-x}Ti_xS₂ Materials and Their Hydrogen Production Abilities on Methanol/Water Photosplitting. *International Journal of Photoenergy*, 479508.
- [11] Etefagh, R., Shahtahmasebi, N. and Karimipour, M. (2013) Effect of Zn Doping on Optical Properties and Photoconductivity of SnS₂ Nanocrystalline Thin Films. *Bulletin of Materials Science*, **36**, 411-416. <https://doi.org/10.1007/s12034-013-0481-0>
- [12] Sun, L.L., Zhou, W., Liu, Y.Y., Yu, D.D., Liang, Y.H. and Wu, P. (2016) Theoretical Perspective on the Electronic, Magnetic and Optical Properties of Zn-Doped Monolayer SnS₂. *Applied Surface Science*, **389**, 484-490. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.07.150>
- [13] Peng, H.W., Xiang, H.J., Wei, S.H., Li, S.S., Xia, J.B. and Li, J.B. (2009) Origin and Enhancement of Hole-Induced Ferromagnetism in First-Row d⁰ Semiconductors. *Physical Review Letter*, **102**, 017201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.017201>
- [14] Kresse, G. and Hafner, J. (1993) Ab Initio Molecular Dynamics for Liquid Metals. *Physical Review B*, **47**, 558-561. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.558>
- [15] Kresse, G. and Hafner, J. (1994) Ab Initio Molecular-Dynamics Simulation of the Liquid-Metal-Amorphous-Semiconductor Transition in Germanium. *Physical Review B*, **49**, 14251-14269. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.14251>
- [16] Kresse, G. and Furthmüller, J. (1996) Efficiency of *ab Initio* Total Energy Calculations for Metals and Semiconductors Using a Plane-Wave Basis Set. *Computational Materials Science*, **6**, 15-50. [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
- [17] Kresse, G. and Joubert, D. (1999) From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method. *Physical Review B*, **59**, 1758-1775. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
- [18] Wang, Y., Gould, T., Dobson, J.F., Zhang, H.M., Yang, H.G., Yao, X.D. and Zhao, H.J. (2014) Density Functional Theory Analysis of Structural and Electronic Properties of Orthorhombic Perovskite CH₃NH₃PbI₃. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **16**, 1424-1429. <https://doi.org/10.1039/C3CP54479F>
- [19] Dion, M., Rydberg, H., Schroder, E., Langreth, D.C. and Lundqvist, B.I. (2004) Van der Waals Density Functional for General Geometries. *Physical Review Letters*, **92**, Article ID: 246401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.246401>
- [20] Sun, J., Wang, H.T., He, J.L. and Tian, Y.J. (2005) *Ab Initio* Investigations of Optical Properties of the High-Pressure Phases of ZnO. *Physical Review B*, **71**, Article ID: 125132. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.125132>
- [21] Toh, M.L., Tan, K.J., Wei, F.X., Zhang, K.K., Jiang, H. and Kloc, C. (2013) Intercalation of Organic Molecules into SnS₂ Single Crystals. *Journal of Solid State Chemistry*, **198**, 224-230. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2012.10.002>
- [22] Arora, S.K., Patel, D.H. and Agarwal, M.K. (1993) Microtopographical Characterization of Vapour-Grown SnS₂ Single Crystals. *Crystal Research and Technology*, **28**, 623-627. <https://doi.org/10.1002/crat.2170280509>
- [23] Hu, X.H., Song, G.S., Li, W.Y., Peng, Y.L., Jiang, L., Xue, Y.F., Liu, Q., Chen, Z.G. and Hu, J.Q. (2013) Phase-Controlled Synthesis and Photocatalytic Properties of SnS, SnS₂ and SnS/SnS₂ Heterostructure Nanocrystals. *Materials Research Bulletin*, **48**, 2325-2332. <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2013.02.082>
- [24] Xia, C.X., Zhao, X., Peng, Y.T., Zhang, H., Wei, S.Y. and Jia, Y. (2015) First-Principles Study of Group V and VII Impurities in SnS₂. *Superlattices and Microstructures*, **85**, 664-671. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2015.05.050>
- [25] Golberg, D., Bando, Y., Huang, Y., Terao, T., Mitome, M., Tang, C. and Zhi, C. (2010) Boron Nitride Nanotubes and

Nanosheets. *ACS Nano*, **4**, 2979-2993. <https://doi.org/10.1021/nn1006495>

- [26] Wang, Q.H., Kalantar-Zadeh, K., Kis, A., Coleman, J.N. and Strano, M.S. (2012) Electronics and Optoelectronics of Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides. *Nature Nanotechnology*, **7**, 699-712. <https://doi.org/10.1038/nnano.2012.193>
- [27] He, X.C. and Shen, H.L. (2012) *Ab Initio* Calculations of Band Structure and Thermophysical Properties for SnS₂ and SnSe₂. *Physica B*, **407**, 1146-1152. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2012.01.102>
- [28] Karazhanov, S.Zh., Ravindran, P., Kjekshus, A., Fjellvåg, H. and Svensson, B.G. (2007) Electronic Structure and Optical Properties of ZnX (X = O, S, Se, Te): A Density Functional Study. *Physical Review B*, **75**, Article ID: 155104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.155104>

知网检索的两种方式:

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>
下拉列表框选择: [ISSN], 输入期刊 ISSN: 2160-7613, 即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>
左侧“国际文献总库”进入, 输入文章标题, 即可查询

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: ms@hanspub.org