

# 双轴应变和外部电场对单层MgI<sub>2</sub>电子结构的调控

钱胜辉, 高佳喜, 刘光华\*

天津工业大学, 物理科学与技术学院, 天津

收稿日期: 2021年8月27日; 录用日期: 2021年10月6日; 发布日期: 2021年10月13日

## 摘要

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 研究了施加双轴应变及外电场对单层MgI<sub>2</sub>电子结构的影响, 并分析了能带图、态密度图等。计算结果表明: 纯净体系的单层MgI<sub>2</sub>是一个间接半导体, 能隙值为3.602 eV。声子谱没有虚频表明其结构可以稳定存在。随着双轴应变值从-10%到10%, 单层MgI<sub>2</sub>能隙值从2.944 eV变化到3.406 eV。有趣的是, 在应变值-10%到4%下, 能隙值一直在增加, 在4%到10%范围内, 能隙值在减小, 并且在4%这个应变值下获得最大能隙值3.673 eV。将外部电场设置为0 eV/Å/e至1 eV/Å/e, 发现单层MgI<sub>2</sub>在0.2 eV/Å/e到0.4 eV/Å/e电场下能隙值与纯净体系能隙值相差不大, 在0.6 eV/Å/e至0.7 eV/Å/e半导体类型由间接能隙半导体变为直接能隙半导体, 0.9 eV/Å/e到1.0 eV/Å/e变为金属, 因此判定在0.7 eV/Å/e到0.9 eV/Å/e之间发生了半导体到金属的相变。

## 关键词

单层MgI<sub>2</sub>, 第一性原理计算, 电子结构, 双轴应变, 外加电场

# Tuning the Electronic Structure of Monolayer MgI<sub>2</sub> by Biaxial Strain and External Electric Field

Shenghui Qian, Jiayi Gao, Guanghua Liu\*

School of Physical Science and Technology, Tiangong University, Tianjin

Received: Aug. 27<sup>th</sup>, 2021; accepted: Oct. 6<sup>th</sup>, 2021; published: Oct. 13<sup>th</sup>, 2021

\*通讯作者。

## Abstract

In this paper, the effects of biaxial strain and external electric field on the electronic structure of monolayer  $\text{MgI}_2$  are studied by using the first principle method based on density functional theory, and the energy band diagram and density of states diagram are analyzed. The results show that the monolayer  $\text{MgI}_2$  of the pure system is an indirect semiconductor with a band gap of 3.602 eV. The phonon spectrum has no virtual frequency, indicating that it can exist stably. With the biaxial strain from  $-10\%$  to  $10\%$ , the band gap of monolayer  $\text{MgI}_2$  changes from 2.944 eV to 3.406 eV. Interestingly, the strain value is  $-10\%$  to  $4\%$ , the energy gap value is increasing, the energy gap value is decreasing in the range of  $4\%$  to  $10\%$ , and the maximum strain value of 3.673 eV is obtained at the strain value of  $4\%$ . When the external electric field is set to  $0 \text{ eV/\AA/e}$  to  $1 \text{ eV/\AA/e}$ , it is found that the band gap value of monolayer  $\text{MgI}_2$  is almost the same as that of pure system under the electric field of  $0.2 \text{ eV/\AA/e}$  to  $0.4 \text{ eV/\AA/e}$ , and the semiconductor type changes from indirect band gap semiconductor to direct band gap semiconductor under  $0.6 \text{ eV/\AA/e}$  to  $0.7 \text{ eV/\AA/e}$ , from  $0.9 \text{ eV/\AA/e}$  to  $1.0 \text{ eV/\AA/e}$  to metal. Therefore, it is determined that a semiconductor to metal phase transition has occurred between  $0.7 \text{ eV/\AA/e}$  and  $0.9 \text{ eV/\AA/e}$ .

## Keywords

Monolayer  $\text{MgI}_2$ , First-Principle Calculations, Electronic Structure, Biaxial Strain, External Electric Field

Copyright © 2021 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

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



Open Access

## 1. 引言

自从石墨烯被成功制备出来[1], 石墨烯拥有卓越的物理化学性质引起了研究者们极大的兴趣, 但石墨烯的零能隙限制了它在光电材料中的应用[2] [3]。基于此缺陷, 研究者们又把眼光投放到其他二维材料上, 发现了例如硅烯[4]、六角氮化硼[5]、类石墨烯的氧化锌[6]、过渡金属硫化物[7]等。二维材料由于具有比三维块体材料更优异的物理和化学性能, 如大的比表面积、具有原子级别的厚度等, 引起了研究者的广泛关注。此外, 它还具有优良的光学、电学和热力学性能, 因此被广泛应用于自旋电子学、吸附、催化、纳米电子学等领域[8] [9] [10]。

最近, Lu 等人[11]提出了一系列单层金属卤化物  $\text{MX}_2$  ( $\text{M} = \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Zn}, \text{Cd}, \text{Ge}, \text{Pb}; \text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ), 引起了研究者的极大兴趣。Chen 等人[12]研究了双轴应变可调控  $\text{CaI}_2$  单层的电子结构和光学性质, 揭示了双轴应变可从 $-10\%$ 到  $10\%$ 调节能隙。此外, 发现能隙从 $-10\%$ 逐渐增大到  $4\%$ , 在拉伸应变为  $4\%$ 时达到最大值, 然后在应变值为  $4\%$ 到  $10\%$ 时减小。Lima 等人[13]研究了非金属(NM)和过渡金属(TM)原子掺杂单层  $\text{MgCl}_2$ , 发现单层  $\text{MgCl}_2$  的磁矩和能隙可以有效地改变。Hoat 等人[14]分析了通过施加应变和外加电场来调节二维  $\text{GeI}_2$  的电子结构, 研究结果表明二维  $\text{GeI}_2$  属于能隙为 2.188 eV 的间接半导体。随着双轴应变(XY 方向)从  $12\%$ 到 $-12\%$ 的变化, 当应变值达到 $-6\%$ 时,  $2\text{D GeI}_2$  的能隙曲线略有增加, 但在应变 $-6\%$ 到  $12\%$ 时, 能隙曲线缓慢下降。Almayyali 等[15]研究了碘化锌( $\text{ZnI}_2$ )在双轴应变( $-6\%$ 到  $6\%$ )作用下的电子和光学性质, 发现能隙逐渐增加。

对于单层金属卤化物  $\text{MgI}_2$  至今报道还很少, 双轴应变及外加电场会带来什么样的物理现象尚不清

楚, Lu [11]表明  $\text{MgI}_2$  是一种能带值为 3.67 eV 的间接半导体。因此, 对于单层  $\text{MgI}_2$ , 我们利用基于 DFT (density functional theory) 的第一性原理方法研究了施加双轴应变及外电场的单层  $\text{MgI}_2$  的电子结构。计算发现施加双轴应变及外部电场可以有效调节的单层  $\text{MgI}_2$  电子结构。我们将双轴应变范围设置为-10%至 10%, 计算结果表明, 在应变范围为-10%至 4%时, 能隙值逐渐增大, 但在双轴应变范围为 4%至 10%时, 能隙值减小。将外部电场设置为 0 eV/Å/e 至 1 eV/Å/e, 发现单层  $\text{MgI}_2$  在 0.2 eV/Å/e 到 0.4 eV/Å/e 电场下能隙值同纯净体系相差不大, 说明能隙值在弱电场下的变化不明显。而在强电场下 0.6 eV/Å/e 到 0.7 eV/Å/e 能隙值在逐渐减小以及半导体类型发生了由间接能隙半导体变为直接能隙半导体, 最终在 0.9 eV/Å/e 到 1.0 eV/Å/e 变化为金属并且产生了磁性, 说明单层  $\text{MgI}_2$  在电场 0.7 eV/Å/e 到 0.9 eV/Å/e 之间发生了半导体到金属的相变。

## 2. 计算方法

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理方法 CASTEP 软件计算了电子结构及态密度[16] [17]。选择广义梯度近似(GGA)和 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)作为交换关联势[18]。为了描述原子核和价电子之间的关系, 分别选择  $2p_63s_2$  和  $5s_25p_5$  作为 Mg 和 I 的价态。我们选择模守恒赝势。为了避免沿 z 轴方向的周期层的相互作用, 使用了 20 Å 的真空层。我们使用 Grimme [19]提出的经验色散校正 DFT-D 方法来消除弱范德华相互作用。截断能设置为 1000 eV, 布里渊区取样使用  $14 \times 14 \times 1k$  点 Monkhorst-Pack 网格[20]。所有结构均完全松弛, 直至收敛, 总能量和力的最小值分别为  $1 \times 10^{-6}$  eV 和 0.01 eV/Å。

应变系数  $\varepsilon$  定义为:

$$\varepsilon = \frac{a - a_0}{a_0} \times 100\% \quad (1)$$

其中,  $a$  和  $a_0$  分别表示有应变和无应变的晶格参数。双轴应变范围为-10%至 10%, 设置 2%为一个步长点, 负值和正值分别代表压缩应变和拉伸应变。对于外加电场来说, 设置范围为 0 eV/Å/e 至 1 eV/Å/e, 同样设置 0.2 eV/Å/e 作为一个步长点。

## 3. 结果与讨论

### 3.1. 单层 $\text{MgI}_2$ 的电子结构和结构稳定性

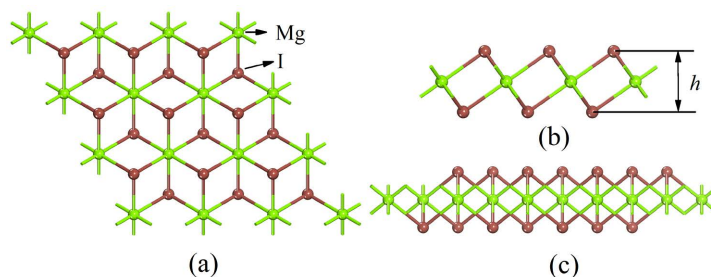


Figure 1. (a) Top- (b) Front- and (c) Side view of monolayer  $\text{MgI}_2$   
图 1. 单层  $\text{MgI}_2$  (a)俯视图-(b) 正视图-及(c) 侧视图

单层  $\text{MgI}_2$  为六方晶体结构, 空间群为 P-3M1(No.164)。图 1(a)、图 1(b)和图 1(c)分别显示了单层  $\text{MgI}_2$  的俯视图、正视图和侧视图。从图 1(c)可以看出,  $\text{MgI}_2$  具有三个原子层 I-Mg-I, 每个 Mg 原子周围有六个 I 原子, 形成八面体配位[21]。单层  $\text{MgI}_2$  的优化晶格参数为  $a = b = 4.17$  Å, 键长( $d_{\text{Mg-I}}$ ), 键角( $\theta_{\text{Mg-I-Mg}}$ )和原子层厚度( $h_{\text{I-I}}$ )分别为 2.939 Å,  $90.383^\circ$  和 3.371 Å, 与先前的理论值一致[11] [22], 这些优化结果表明

了我们的参数设置是合理的，计算结果是可靠的。

表 1 显示了  $\text{MgI}_2$  的键长( $d_{\text{Mg-I}}$ )、键角( $\theta_{\text{Mg-I-Mg}}$ )和原子层厚度( $h_{\text{I-I}}$ )随不同双轴应变值变化的结果。双轴应变在-10%到 10%之间时，键长( $d_{\text{Mg-I}}$ )和键角( $\theta_{\text{Mg-I-Mg}}$ )逐渐增大，但原子层厚度( $h_{\text{I-I}}$ )逐渐减小。为了验证单层  $\text{MgI}_2$  的稳定性，计算了声子谱。发现纯净态单层  $\text{MgI}_2$  (见图 2)的声子色散曲线没有虚频，因此证实了单层  $\text{MgI}_2$  的稳定性。图 3 显示了本征单层  $\text{MgI}_2$  的能带以及总态密度和分态密度(total and partial density of states, TDOS 和 PDOS)。从图 3 可以看出，单层  $\text{MgI}_2$  是一种间接半导体，能带值为 3.602 eV，TDOS 主要来自价带的 I-5p 轨道，导带主要来自 Mg-3s 轨道和 I-5p 轨道的 sp 杂化，这与之前的数据一致[7]。此外，价带最大值(VBM)和导带最小值(CBM)分别位于  $\Gamma$  和 M 点。

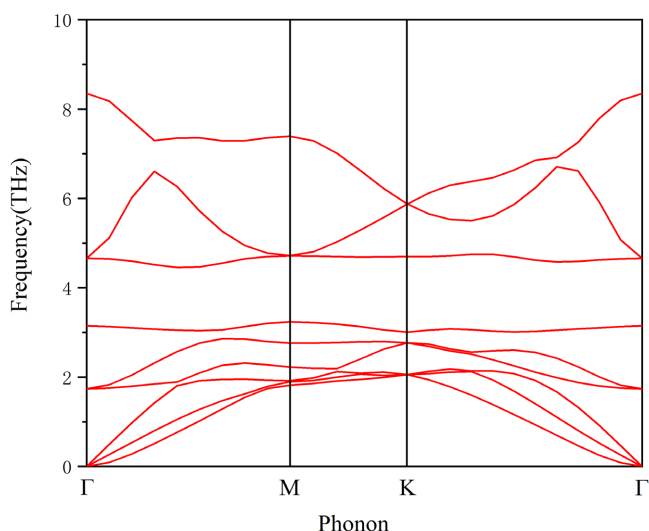


Figure 2. The phonon dispersion curve of pure monolayer  $\text{MgI}_2$

图 2. 纯净态单层  $\text{MgI}_2$  的声子色散曲线

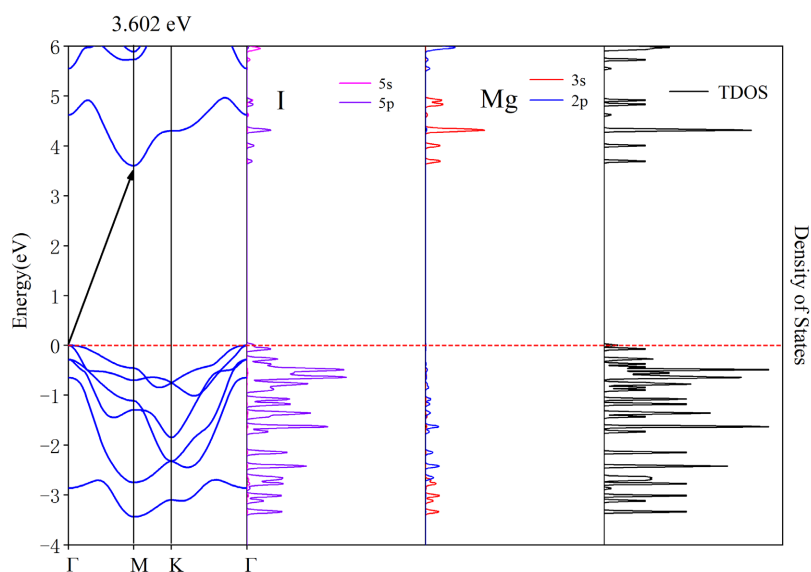


Figure 3. The energy band gap, total and partial density of states (TDOS and PDOS) of monolayer  $\text{MgI}_2$

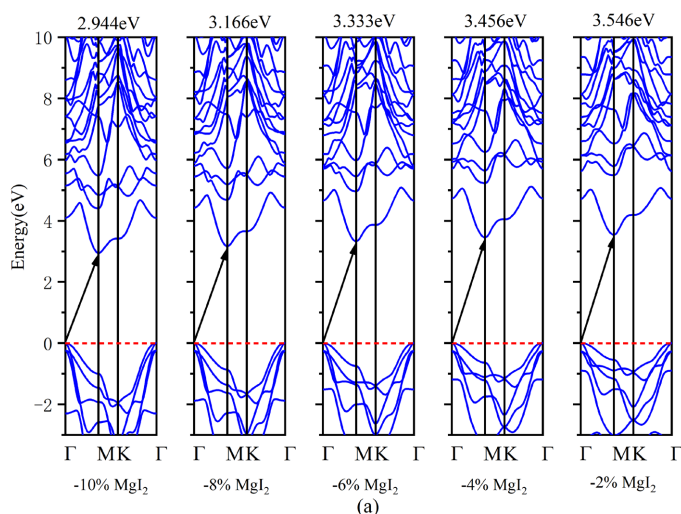
图 3. 单层  $\text{MgI}_2$  的能带，总态密度和分态密度图

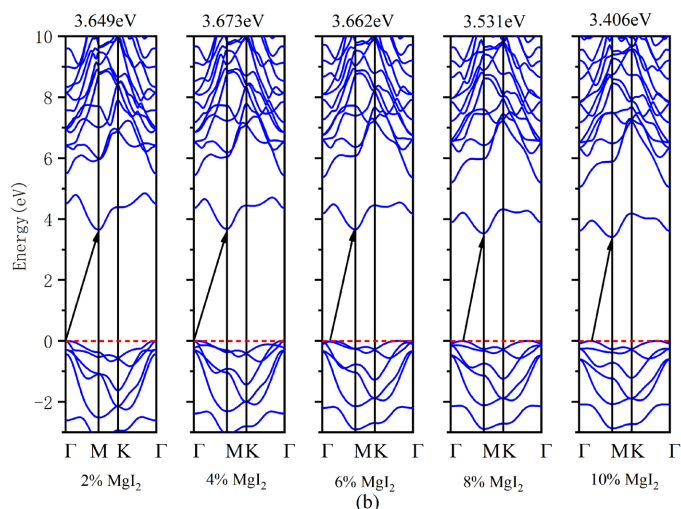
### 3.2. 双轴应变下的单层 $\text{MgI}_2$ 的电子结构

图 4(a)和图 4(b)揭示了单层  $\text{MgI}_2$  的能带受双轴应变的影响。计算的能带的高对称点方向选择为  $\Gamma \rightarrow \text{M} \rightarrow \text{K} \rightarrow \Gamma$ 。从图 4(a)和图 4(b)中, 我们观察到在双轴应变下单层  $\text{MgI}_2$  仍然是间接半导体, 没有改变半导体的类型。并且在双轴应变值为 $-10\%$ 到  $10\%$ 时, 能隙值从  $2.944 \text{ eV}$  变化到  $3.406 \text{ eV}$ 。这是因为双轴应变可以有效地改变晶格参数, 进而改变布里渊区的大小。当应变值在 $-10\%$ 到  $4\%$ 之间时, 价带最大值(valence band maximum, VBM)和导带最小值(conduction band minimum, CBM)仍然分别位于  $\Gamma$  和 M 点。然而, 随着应变范围从  $6\%$ 到  $10\%$ , 价带最大值(VBM)略微偏离  $\Gamma$  点向 M 点移动。图 5 显示单层  $\text{MgI}_2$  的能隙值曲线。从图 5 可以清楚地看出, 随着压缩应变的增加, 能隙值逐渐增加。而在拉伸应变下, 能隙先增大后减小, 最大能隙值在双轴应变值为  $4\%$ 的情况下取得, 数值为  $3.673 \text{ eV}$ 。出现这种现象的原因是双轴应变的施加影响了原子之间的相对位置, 从而影响了原子与原子之间的成键性质和强度, 进而导致能带结构发生改变。通过分析态密度(DOS)图发现双轴应变下单层  $\text{MgI}_2$  的价带部分是由  $\text{Mg-3s}$  和  $\text{I-5p}$  轨道的  $sp$  杂化共同贡献, 发现在 $-10\%$ 到  $10\%$ 应变下态密度为零的价带部分所占据的能量值先增大后减小, 在  $4\%$ 这个应变值下能量值最大。因此, 能隙的变化也是先增大后减小。结果表明, 双轴应变下的能隙变化趋势与  $\text{CaI}_2$  相似[8]。

**Table 1.** The Bond Length  $d_{\text{Mg-I}}$  ( $\text{\AA}$ ), Bond Angle  $\theta_{\text{Mg-I-Mg}}$  ( $^\circ$ ) and Atomic Layer Thickness ( $h_{\text{I-I}}$ ) ( $\text{\AA}$ ) of  $\text{MgI}_2$  with Biaxial Strain  
**表 1.** 双轴应变下  $\text{MgI}_2$  的键长  $d_{\text{Mg-I}}$  ( $\text{\AA}$ ), 键角  $\theta_{\text{Mg-I-Mg}}$  ( $^\circ$ ) 及原子层厚度( $h_{\text{I-I}}$ ) ( $\text{\AA}$ )

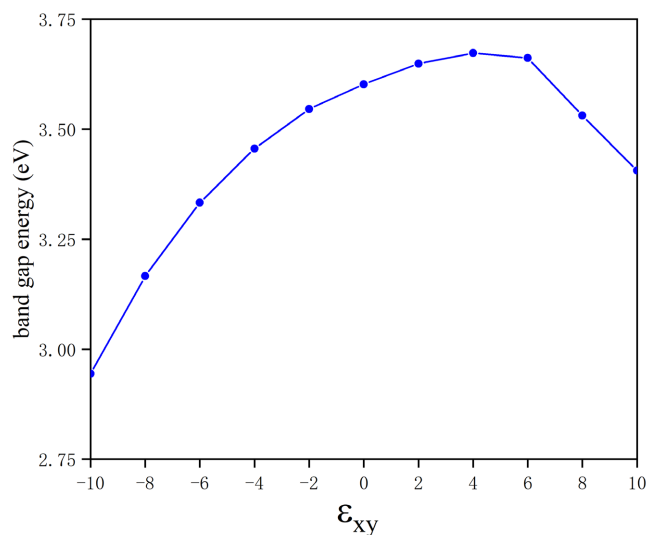
Biaxial Strain	$d_{\text{Mg-I}}$ ( $\text{\AA}$ )	$\theta_{\text{Mg-I-Mg}}$ ( $^\circ$ )	$h_{\text{I-I}}$ ( $\text{\AA}$ )
$-10\%$	2.828	83.128	3.635
$-8\%$	2.849	84.651	3.583
$-6\%$	2.870	86.138	3.530
$-4\%$	2.892	87.589	3.477
$-2\%$	2.915	89.003	3.424
0	2.939	90.383	3.371
$2\%$	2.964	91.708	3.318
$4\%$	2.989	93.009	3.265
$6\%$	3.105	94.275	3.211
$8\%$	3.042	95.510	3.157
$10\%$	3.069	96.718	3.101





**Figure 4.** (a) The energy band versus under different compressive strain. (b) The energy band versus under different tensile strain

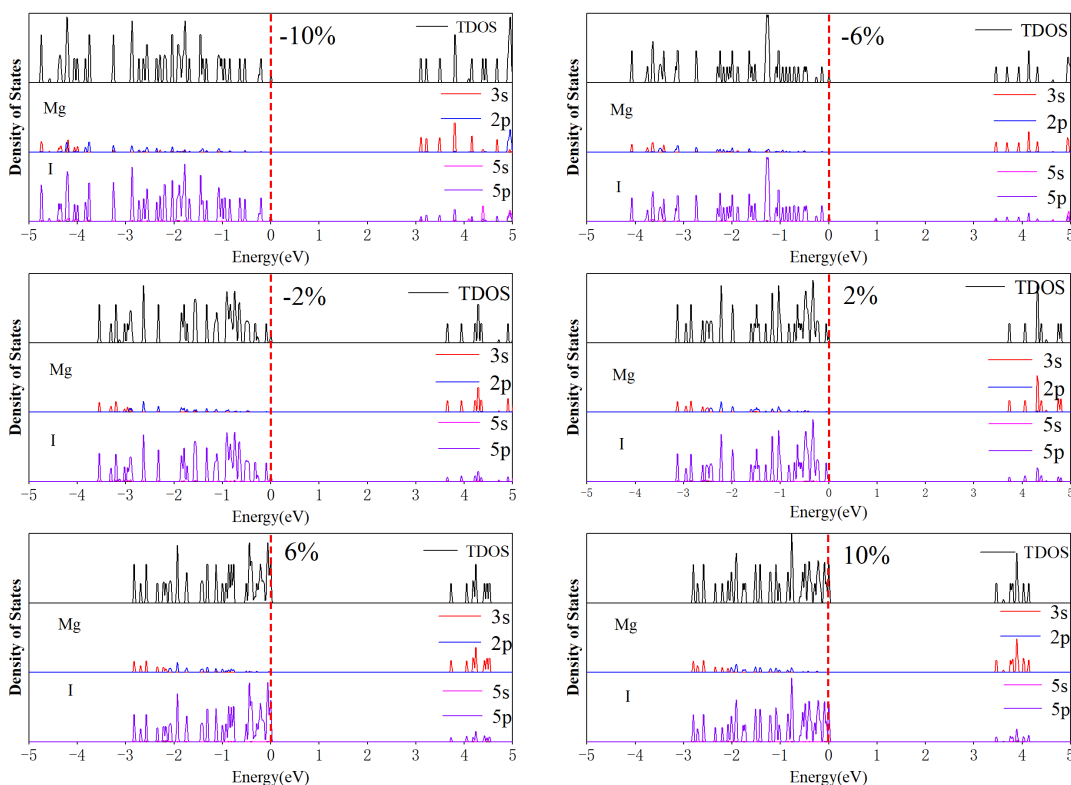
**图 4.** (a) 压缩应变下的能隙曲线。(b) 拉伸应变下的能隙曲线



**Figure 5.** The energy band values curve of monolayer  $\text{MgI}_2$  with different biaxial strain

**图 5.** 不同应变下的单层  $\text{MgI}_2$  的能隙曲线

为了更好地分析能隙的变化，以及解释为什么出现能隙先增大后减小的原因。我们计算了不同双轴应变下单层  $\text{MgI}_2$  的总态密度和分态密度(TDOS 和 PDOS)。选取的能量范围从  $-5 \text{ eV}$  到  $5 \text{ eV}$  之间，这包括了费米能级附近导带和价带的电子信息分布。从图 6 中我们可以清楚地发现，随着应变值的增加，价带的扩展能范围变得越来越窄。其中，当应变值为  $-10\%$  时，总态密度(TDOS)在价带部分的边缘能量值为  $-4.9 \text{ eV}$ ；当应变值为  $10\%$  时，它变化为  $-2.82 \text{ eV}$ 。出现能隙先增大后减小的原因是双轴应变的施加影响了原子之间的相对位置，从而影响了原子与原子之间的成键性质和强度，进而导致能带结构发生改变。通过我们分析总态密度(TDOS)图和分态密度(PDOS)发现双轴应变下单层  $\text{MgI}_2$  的价带部分是由  $\text{Mg-3s}$  和  $\text{I-5p}$  轨道的  $sp$  杂化共同贡献，在  $-10\%$  到  $10\%$  应变下态密度为零的价带部分所占据的能量值先增大后减小，在  $4\%$  这个应变值下能量值最大。因此，相对应能隙的变化也是先增大后减小。



**Figure 6.** The total and project density of state (TDOS and PDOS) of monolayer  $\text{MgI}_2$  under biaxial strain

**图 6.** 双轴应变下单层  $\text{MgI}_2$  的总态密度和分态密度图

为了更好地理解在双轴应变下单层  $\text{MgI}_2$  中的内部电荷分布，我们计算了布居数。表 2 显示 Mg 和 I 的总电荷和转移电荷，其中，表 2 中的 Mg total 和 I total 分别表示单层  $\text{MgI}_2$  中 Mg 原子和 I 原子拥有的固有电荷数，Mg charge 和 I charge 分别表示转移电荷数。从表 2 可以清楚地发现 Mg 原子和 I 原子分别携带正电荷和负电荷。随着双轴应变从 -10% 增加到 10%，Mg 和 I 的总电荷分别减少和增加，这意味着电荷逐渐从 Mg 原子转移到 I 原子。

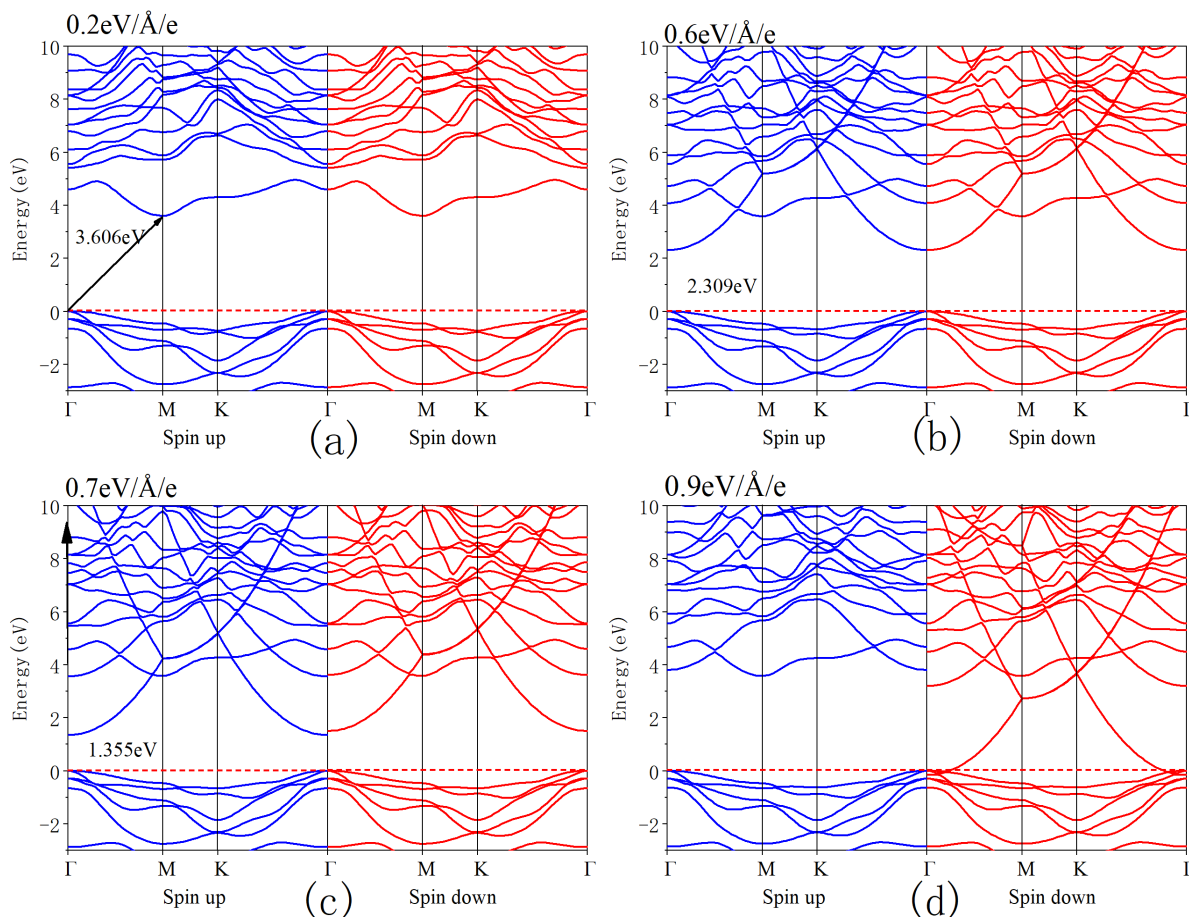
**Table 2.** Internal charge distribution ( $e$ ) of constituent atoms in the  $\text{MgI}_2$  monolayer under biaxial strain by Mulliken population analysis

**表 2.** 通过 Mulliken 布居分析研究了双轴应变下  $\text{MgI}_2$  单层中组成原子的内部电荷分布( $e$ )

Biaxial Strain	Mg total	Mg charge	I total	I charge
-10%	4.82	0.35	3.59	-0.18
-8%	4.82	0.37	3.59	-0.18
-6%	4.81	0.38	3.60	-0.19
-4%	4.80	0.40	3.60	-0.20
-2%	4.79	0.41	3.60	-0.21
0	4.78	0.43	3.61	-0.22
2%	4.78	0.45	3.61	-0.22
4%	4.77	0.46	3.62	-0.23
6%	4.76	0.48	3.62	-0.24
8%	4.75	0.49	3.62	-0.25
10%	4.75	0.50	3.63	-0.25

### 3.3. 施加外电场对单层 $\text{MgI}_2$ 的电子结构调控

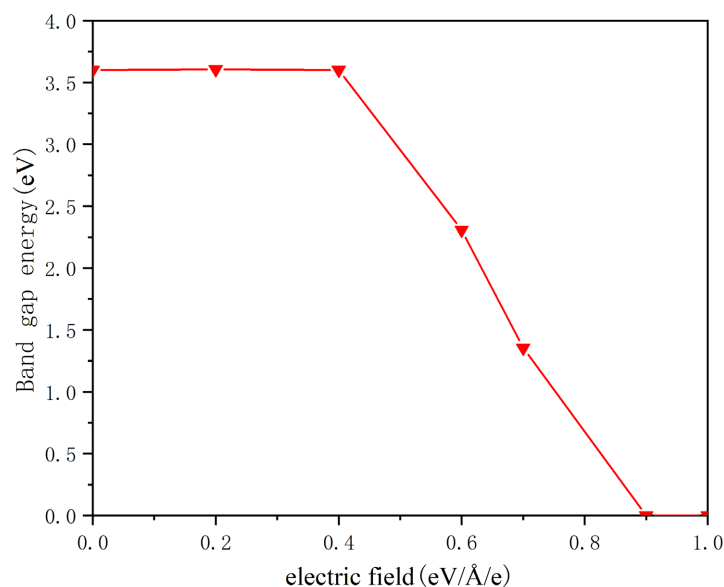
接下来我们研究了施加外电场  $E$  调控单层  $\text{MgI}_2$  能带结构。施加的电场方向垂直于  $xy$  平面，平行于  $z$  轴，电场的方向沿着  $z$  轴向上。观察到的施加外电场调控单层  $\text{MgI}_2$  的能带结构展示在图 7。能隙的变化趋势曲线展示在图 8。在  $0.2 \text{ eV/\text{Å/e}}$  时能隙值为  $3.606 \text{ eV}$ ，施加电场为  $1.0 \text{ eV/\text{Å/e}}$  时则变成了金属。从图 7 和图 8 中可以观察到在电场为  $0.2 \text{ eV/\text{Å/e}}$  至  $0.4 \text{ eV/\text{Å/e}}$  时，能隙值变化和纯净单层  $\text{MgI}_2$  能隙值相差不大，说明弱电场对于单层  $\text{MgI}_2$  能带结构的影响不大，单层  $\text{MgI}_2$  仍然是一个间接能隙半导体。当电场施加到  $0.6 \text{ eV/\text{Å/e}}$  到  $0.7 \text{ eV/\text{Å/e}}$  时，单层  $\text{MgI}_2$  能隙值和半导体类型发生了明显的改变，能隙值突然分别降低到  $2.309 \text{ eV}$  和  $1.355 \text{ eV}$  并且变为直接能隙半导体。证明强电场可以有效缩短单层  $\text{MgI}_2$  的禁带宽度和改变半导体的类型。众所周知，电场效应下的范德瓦尔斯异质结构中的耦合对能带有显著影响会导致发生半导体到金属相变。我们观察到在  $0.7 \text{ eV/\text{Å/e}}$  时单层  $\text{MgI}_2$  是一个直接能隙的半导体，在  $0.9 \text{ eV/\text{Å/e}}$  时变为了半金属，因此可以推测出在  $0.7 \text{ eV/\text{Å/e}}$  至  $0.9 \text{ eV/\text{Å/e}}$  之间单层  $\text{MgI}_2$  发生了半导体到金属的相变。发生这个相变的原因是：施加电场能够使半导体发生极化，使正负电荷重心偏离，随着电场强度的不断增加，电极化会越来越剧烈。当电场大到一定程度时，电子可以由束缚态变游离态，最终可以导电变为金属。因此，施加电场可以使单层  $\text{MgI}_2$  发生半导体到金属的相变。并且， $0.9 \text{ eV/\text{Å/e}}$  到  $1.0 \text{ eV/\text{Å/e}}$  下的单层  $\text{MgI}_2$  还拥有了铁磁性。



**Figure 7.** Band structure of  $\text{MgI}_2$  monolayer applied electric field

**图 7.** 施加电场下的单层  $\text{MgI}_2$  的能带结构





**Figure 8.** Band gap curve of  $\text{MgI}_2$  monolayer under electric field

**图 8.** 外加电场下的单层  $\text{MgI}_2$  的能隙变化曲线

#### 4. 结论

本文用第一性原理方法研究了双轴应变及外加电场调控单层  $\text{MgI}_2$  的电子结构。结果表明, 单层  $\text{MgI}_2$  是一种间接能隙半导体, 其能隙值为 3.602 eV, 声子谱没有虚频证实了结构稳定性。价带的 TDOS 主要来自 I-5p 轨道, 导带主要是由 3s-Mg 轨道和 5p-I 轨道 sp 杂化贡献。在 -10%~10% 的双轴应变范围内, 能隙值可以有效地调控, 能隙曲线先增大后减小, 在 4% 时达到最大值 3.673 eV。将外部电场设置为 0 eV/Å/e 至 1 eV/Å/e, 发现单层  $\text{MgI}_2$  在 0.2 eV/Å/e 到 0.4 eV/Å/e 电场下能隙值与纯净体系能隙值相差不大, 在 0.6 eV/Å/e 至 0.7 eV/Å/e 半导体类型由间接能隙半导体变为直接能隙半导体, 0.9 eV/Å/e 到 1.0 eV/Å/e 变为金属, 因此判定在 0.7 eV/Å/e 到 0.9 eV/Å/e 之间发生了半导体到金属的相变。

#### 参考文献

- [1] Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V. *et al.* (2004) Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, **306**, 666-669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- [2] Choi, W., Lahiri, I., Seelaboyina, R. and Kang, Y.S. (2010) Synthesis of Graphene and Its Applications: A Review. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, **35**, 52-71. <https://doi.org/10.1080/10408430903505036>
- [3] Allen, M.J., Tung, V.C. and Kaner, R.B. (2010) Honeycomb Carbon: A Review of Graphene. *Chemical Reviews*, **110**, 132-145. <https://doi.org/10.1021/cr900070d>
- [4] Feng, B.J., Ding, Z.J., Meng, S., Yao, Y., He, X., Cheng, P., *et al.* (2012) Evidence of Silicene in Honeycomb Structures of Silicon on Ag(111). *Nano Letters*, **12**, 3507-3511. <https://doi.org/10.1021/nl301047g>
- [5] Zhang, K., Feng, Y., Wang, F., Yang, Z.C. and Wang, J. (2017) Two Dimensional Hexagonal Boron Nitride (2D-hBN): Synthesis, Properties and Applications. *Journal of Materials Chemistry C*, **5**, 11992-12022. <https://doi.org/10.1039/C7TC04300G>
- [6] Huy, T., Liang, Z., Darius, P., Pang, J., Trzebiecka, B., Rellinghaus, B., *et al.* (2016) Graphene-Like ZnO: A Mini Review. *Crystals*, **6**, Article No. 100. <https://doi.org/10.3390/cryst6080100>
- [7] Lee, Y.-H., Zhang, X.-Q., Zhang, W.-J., Chang, M.-T., Lin, C.-T., Chang, K.-D., *et al.* (2012) Synthesis of Large-Area  $\text{MoS}_2$  Atomic Layers with Chemical Vapor Deposition. *Advanced Materials*, **24**, 2320-2325. <https://doi.org/10.1002/adma.201104798>
- [8] Cahangirov, S., Topsakal, M., Aktuerk, E., Şahin, H. and Ciraci, S. (2009) Two- and One-Dimensional Honeycomb

- Structures of Silicon and Germanium. *Physical Review Letters*, **102**, Article No. 236804. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.236804>
- [9] Wen, J.Q., Zhang, J.M., Yang, X. and Wu, H. (2018) Computational Research of Electronic and Magnetic Properties of Nonmetal Doping of Graphene-Like ZnO Monolayer. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, **31**, 1833-1840. <https://doi.org/10.1007/s10948-017-4403-z>
- [10] Watanabe, K., Taniguchi, T. and Kanda, H. (2004) Direct-Band Gap Properties and Evidence for Ultraviolet Lasing of Hexagonal Boron Nitride Single Crystal. *Nature Materials*, **3**, 404-409. <https://doi.org/10.1038/nmat1134>
- [11] Lu, F., Wang, W.C., Luo, X.G., Xie, X., Cheng, Y., Dong, H., *et al.* (2016) A Class of Monolayer Metal Halogenides MX<sub>2</sub>: Electronic Structures and Band Alignments. *Applied Physics Letters*, **108**, Article ID: 132104. <https://doi.org/10.1063/1.4945366>
- [12] Chen, X.F., Wang, L., Zeng, Z.Y., Chen, X.-R. and Chen, Q.-F. (2020) Strain-Tunable Electronic, Elastic, and Optical Properties of CaI<sub>2</sub> Monolayer: First-Principles Study. *Philosophical Magazine*, **100**, 1982-2000. <https://doi.org/10.1080/14786435.2020.1752407>
- [13] Lima, I.T., Vasconcelos, R., Gargano, R. and Paura, E.N.C. (2020) A First-Principles Study of the Substitutional Doping of MgCl<sub>2</sub> Monolayer for Spintronics Applications. *New Journal of Chemistry*, **44**, 8833-8839. <https://doi.org/10.1039/D0NJ01264E>
- [14] Hoat, D.M., Vu, T.V., Obeid, M.M. and Jappor, H.R. (2019) Tuning the Electronic Structure of 2D Materials by Strain and External Electric Field: Case of GeI<sub>2</sub> Monolayer. *Chemical Physics*, **527**, Article ID: 110499. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2019.110499>
- [15] Almayyali, A.O.M., Muhsen, H.O., Muhsen, M., Obeid, M.M. and Rahman Jappor, H. (2021) Two-Dimensional ZnI<sub>2</sub> Monolayer as a Photocatalyst for Water Splitting and Improvement Its Electronic and Optical Properties by Strains. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, **126**, Article No. 114487. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.114487>
- [16] Segall, M.D., Lindan, P.J.D., Probert, M.J., Pickard, C.J., Hasnip, P.J., Clark, S.J., *et al.* (2002) First-Principles Simulation: Ideas, Illustrations and the Castep Code. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **14**, 2717-2744. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/11/301>
- [17] Clark, S.J., Segall, M.D., Pickard, C.J., Hasnip, P.J., Probert, M.J., Refson, K., *et al.* (2005) First Principles Methods Using Castep. *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*, **220**, 567-570. <https://doi.org/10.1524/zkri.220.5.567.65075>
- [18] Perdew, J.P., Burke, K. and Ernzerhof, M. (1998) Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, **77**, 3865-3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- [19] Grimme, S. (2004) Accurate Description of van der Waals Complexes by Density Functional Theory Including Empirical Corrections. *Journal of Computational Chemistry*, **25**, 1463-1473. <https://doi.org/10.1002/jcc.20078>
- [20] Monkhorst, H.J. and Pack, J.D. (1976) Special Points for Brillouin-Zone Integrations. *Physical Review B*, **13**, 5188-5192. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- [21] Soled, S., Wold, A. and Gorochoy, O. (1976) Crystal Growth and Characterization of Several Platinum Sulfoselenides. *Materials Research Bulletin*, **11**, 927-932. [https://doi.org/10.1016/0025-5408\(76\)90165-3](https://doi.org/10.1016/0025-5408(76)90165-3)
- [22] Ataca, C., Ahin, H. and Ciraci, S. (2012) Stable, Single-Layer MX<sub>2</sub> Transition-Metal Oxides and Dichalcogenides in a Honeycomb-Like Structure. *Journal of Physical Chemistry C*, **116**, 8983-8999. <https://doi.org/10.1021/jp212558p>