

二维碳材料电子结构与光学性质的第一性原理研究

李 洋, 敖铃翊, 王 强

(西南大学, 重庆 400715)

摘 要: 基于密度泛函理论, 研究了二维碳材料石墨烯和石墨炔的电子结构和光学性质。计算结果表明, 石墨烯比石墨炔更稳定, 在费米能级附近它们的电子态主要由 C-2p 态贡献; 石墨烯在可见光区域是透明的并且表现出良好的非线性光学吸收特性和电导率; 石墨炔的光吸收和光电导对长波下的可见光响应明显, 在费米能级附近的电子跃迁, 除了从价带到导带的跃迁外还存在带间跃迁。本研究结果可为二维碳材料石墨烯和石墨炔在光电器件、光催化等领域中的应用提供理论依据。

关键词: 石墨烯; 石墨炔; 电子结构; 光学性质

中图分类号: TK91; O613.81; O613.61

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2019)07-2208-07

碳具有 sp^3 , sp^2 和 sp 3 种杂化态, 通过改变杂化方式使得碳的同素异形体丰富多样, 进而表现出不同的物理和化学性质。在自然界中以 sp^2 杂化的三维石墨和 sp^3 杂化的三维金刚石; 通过 sp^2 杂化的零维富勒烯^[1]、一维碳纳米管^[2]、二维石墨烯^[3]和以 sp 、 sp^2 杂化的二维石墨炔^[4]等新型碳纳米材料逐渐被人们熟知。由于二维碳材料石墨烯和石墨炔特殊的电子结构使其在储能、催化、光学、电化学、海水淡化等领域有着重要的应用前景^[5-13]。

2004年 Geim 等^[3]成功制备单层石墨烯(Graphene), 石墨烯由于在费米能级附近形成离域大 π 键, 使得石墨烯具有极高的电子迁移率和电流密度^[14]; 其优良的导电性能^[15], 使得石墨烯制得的电子器件可以实现接近太赫兹的截止频率^[16]; Li^[17]等通过化学气相沉积在铜箔上生长的大面积石墨烯薄膜具有高导电性和高透光率, 适用于透明导电电极的应用; Wang^[18]等指出石墨烯薄膜在作为太阳能电池窗口层电极时具有传统的金属氧化物无法比拟的优势。石墨烯在布里渊区 K 点时由于导带和价带的简并, 造成石墨烯独特的光学性质, 理论^[19]和实验^[20]都表明石墨烯具有极低的不透明度, 只能吸收 2.3%左右的可见光。通过注入电荷来调节石墨烯的光学跃迁机制, 以此来开发石墨烯的红外可调探测器和发射器等^[21]; Elias^[22]等通过调控石墨烯纳米带和量子点的尺寸, 达到光致发光合适的带隙。2010年 Li Yuliang 课题组合成了石墨炔(Graphdiyne)薄膜^[4], 石墨炔作为天然带隙的本

征半导体^[23]表现出优良的电子迁移率^[24]; 由于其特殊的孔洞结构, 使得石墨炔作为锂离子^[25]和钠离子^[26]电池的负极材料具有独特的应用价值; Sun^[27]和 Zhou^[28]等通过密度泛函理论计算得出炔键的数目与其结构的稳定性呈负相关, 其中石墨炔和石墨五炔具有最高和最稳定的储锂量(LiC_3); Huang^[29]等通过制备不同厚度的石墨炔薄膜发现薄膜越薄储锂性能越好; 石墨炔作为新型大 π 共轭性碳材料与 ZnO 纳米粒子的杂化所形成的纳米薄膜对光照具有很高的响应^[30]; Luo^[31]等通过理论与实验发现多体效应对石墨炔的电子结构和光吸收有显著的影响; Kuang^[32]等将石墨炔掺杂在钙钛矿太阳能电池中发现其电子迁移率和光电转化效率都有很大改观, 为石墨炔在光电器件领域的研究提供了新的方向。

本研究通过第一性原理方法对二维碳材料石墨烯和石墨炔的结合能、能带结构、电子态密度、差分电荷密度、Mulliken 布居、吸收谱、光电导率、复折射率和能量损失谱等性质进行了全方位的分析; 希望对二维碳材料石墨烯和石墨炔在光电器件、光催化等领域中的应用提供一些指导性的理论依据。

1 计算方法与模型

本研究计算是基于密度泛函理论(DFT)^[33]的第一性原理方法, 并通过 CASTEP^[34]模块计算完成的, 计算过程采用周期性边界条件, 电子交换关联能采用了广义梯度近似(GGA)^[35]下的交换关联函数^[33], 其中电子的

收稿日期: 2018-07-15

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项资金 (XDJK2017B043, XDJK2017D016); 中国博士后科学基金资助课题 (2017M612886)

作者简介: 李 洋, 男, 1992 年生, 硕士, 西南大学材料与能源学院, 重庆 400715, E-mail: ly11213040@email.swu.edu.cn

波函数由平面波(PAW)^[34]基组展开。由于其结构的二维特性,本研究采用色散修正(DFT-D)下的 Grimme 模块^[36]来提高弱相互作用的计算精度,并且通过采用超软赝势(US-PP)^[37]来实现离子和价电子间的相互作用。其中石墨烯计算模型采用 $3\times 3\times 1$ 的超晶胞形式;对于石墨炔计算单元为单胞。在波矢 K 空间中,石墨烯和石墨炔通过 Monkhorst-Pack 方法^[38]计算采用 $11\times 11\times 1$ 高对称性的特殊 K 点对全布里渊区求和,平面波截断能取 650 eV,为了消除层间相互作用对其结构取 1.5 nm 的真空层,对所建立的模型进行结构优化,设定它们的系统收敛条件为:系统总能量的变化小于 5.0×10^{-6} eV,优化后作用在每个原子上的力小于 0.1 eV/nm,剩余应力低于 0.02 GPa,原子间最大位移偏差稳定在 5.0×10^{-5} nm 以内;然后再进行相应性质的计算。

图 1 为优化后的石墨烯和石墨炔晶体结构模型,作为二维平面网状结构其优化后单胞的晶格常数分别为 0.2462、0.9441 nm 与文献[39,40]保持一致;石墨烯的键长为 0.1423 nm 与文献[39]结果相符,石墨炔的 C_1-C_2 、 C_2-C_3 、 C_3-C_4 、 C_4-C_5 键长分别为 0.1429、0.1393、0.1232、0.1335 nm 与文献[40]报道结果一致,这说明理论计算的结果准确性高,本研究所采用的模型以及计算方法合理。同样石墨烯和石墨炔的碳原子之间的结合能是指在绝对零度下凝聚态的中性原子分离所需求的能量^[41],通常用来衡量其结构的稳定性,如方程(1)所示^[42]。

$$E_{\text{coh}} = \frac{nE_{\text{atom}} - E_{\text{tot}}}{n} \quad (1)$$

式中, E_{tot} 为晶体的总能量, n 为相应结构的碳原子个数, E_{atom} 为单个碳原子的能量;计算得到石墨烯和石墨炔的结合能分别为 9.28 和 8.51 eV,表明石墨炔比石墨炔更稳定。

2 结果与讨论

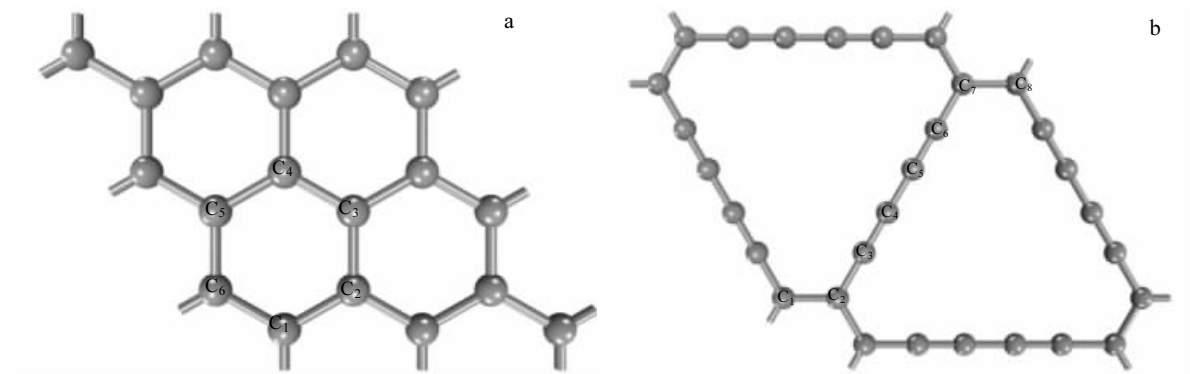


图 1 优化后的晶体结构模型

Fig.1 Optimized crystal structures of graphene (a) and graphdiyne (b)

2.1 电子结构及成键特性

费米能级附近活跃的电子决定了材料的物化性质。图 2 为石墨烯和石墨炔的能带结构图。由图 2a 可知,在费米能级附近,石墨烯在布里渊区 K 点的导带低和价带顶相交(即简并),属于零带隙的半导体,该位置的电子表现为狄拉克费米子(狄拉克锥),与文献[43]结果一致。由图 2b 石墨炔价带最高点和导带最低点都沿着 Γ -M 方向,且其禁带宽度为 0.464 eV。由此可知,石墨炔为在布里渊区 Γ 点直接跃迁的窄能隙半导体。

图 3a、3b 分别为石墨烯和石墨炔的总态密度和分波态密度图,绿色虚线表示费米能级,在费米能级附近石墨烯的电子态主要由 C-2p 态电子贡献;石墨炔的价带由 2 个子带组成,在低能量区主要由 C-2s 态电子决定;而在费米能级附近主要由 C-2p 态电子贡献。同样为了直观地分析石墨烯、石墨炔各碳原子之间化学键性质和强度,对其差分电荷密度进行了计算。由图 3c、3d 可知,红色区域表示电子密度高,蓝色区域表示电子密度低;对于石墨烯,碳原子周围所有电子密度均匀,碳原子与其相邻碳原子的轨道彼此有较强的重叠,说明形成了较强的共价键。而石墨炔的碳原子周围电子密度不一,从 C_2 到 C_4 (C_5 到 C_7) 周围电子密度呈增加趋势,其相应碳原子轨道彼此重叠不断加强,这表明 C_2-C_3 (C_6-C_7)、 C_4-C_5 、 C_3-C_4 (C_5-C_6) 形成共价键且作用不断增强;同样石墨炔的 C_1 和 C_2 周围电子密度保持不变,并且碳原子轨道重叠程度与图 3c 石墨烯相似,其 C_1-C_2 形成与石墨烯强度类似的共价键,为了进一步量化分析电荷在石墨烯和石墨炔的分布情况,本研究还计算了其原子轨道占据数、键长以及电子云重叠布居。由表 1 的计算结果表明:所列化学键均为共价键,碳原子得失电子能力很低,表明石墨烯和石墨炔稳定性很高,并且碳原子的 2p 轨道是形成石墨烯和石墨炔的主要贡献轨

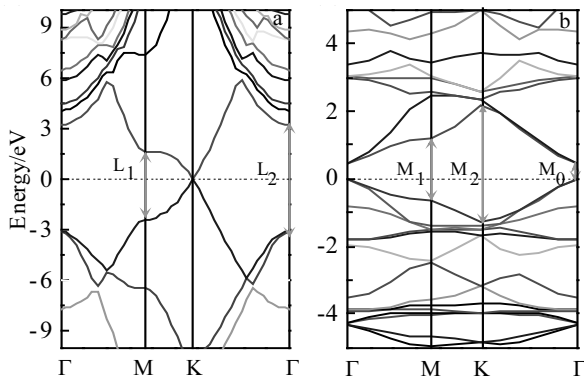


图 2 石墨烯和石墨炔的能带结构

Fig.2 Energy band structures of graphene (a) and graphdiyne (b)

道，这与图 3a, 3b 态密度分析的结果一致。石墨烯 sp^2 杂化的碳原子的键长是 0.1423 nm 与石墨炔 C_1-C_2 (0.1429 nm)的键长近似，且与相对应的电子云重叠布居保持一致，说明它们具有强度相似的共价键。石墨炔中以 sp 和 sp^2 杂化的 C_3-C_2 (C_6-C_7)键长为 0.1393 nm；其中单独以 sp 杂化的 C_4-C_5 、 C_3-C_4 键长分别为 0.1232、0.1335 nm，距离较小的 C_3-C_4 (C_5-C_6)之间形成了碳碳叁键，与其对应的电子云重叠布居数为 1.91，具有很强的共价性，其结果与图 3a、3b 态密度和图 3c、3d 差分电荷密度分析结果一致。

2.2 光吸收与光电导

复介电函数是综合反映介质内部电极化行为的一个主要的宏观物理量，如方程(2)所示。

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \tag{2}$$

式中，介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 是反映物质对光的吸收情

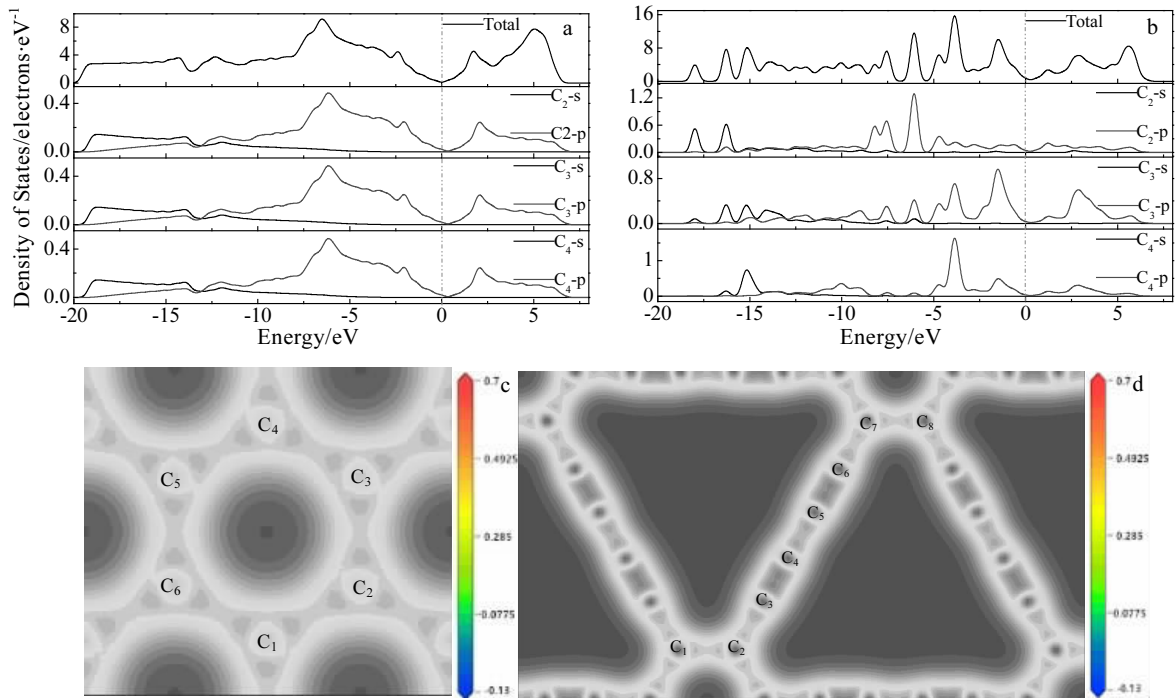


图 3 石墨烯、石墨炔态密度和差分电荷密度

Fig.3 Density of states (a, b) and electric charge density (c, d) of graphene (a, c) and graphdiyne (b, d)

表 1 石墨烯和石墨炔原子轨道电子占据数、原子静电荷、键长(L)、电子云重叠布居(P)

Table 1 Atomic orbital populations, atomic charges, bond lengths, band populations of graphene and graphdiyne

Compound	Atom	s	p	Total	Charge	Bond	L/nm	P
Graphene	C ₁	1.05	2.95	4.00	0.00	C ₁ -C ₂	0.1423	1.08
	C ₂	1.05	2.95	4.00	0.00	C ₂ -C ₃	0.1423	1.08
Graphdiyne	C ₁	1.06	2.97	4.03	-0.03	C ₁ -C ₂	0.1429	1.04
	C ₂	1.06	2.97	4.03	-0.03	C ₂ -C ₃	0.1393	1.10
	C ₃	0.98	2.99	3.97	0.03	C ₃ -C ₄	0.1232	1.91
	C ₄	0.95	3.06	4.01	-0.01	C ₄ -C ₅	0.1335	1.18
	C ₅	0.95	3.06	4.01	-0.01	C ₅ -C ₆	0.1232	1.91
	C ₆	0.98	2.99	3.97	0.03	C ₆ -C ₇	0.1393	1.09

况， $\epsilon_2(\omega)$ 表示振幅的调制即损耗，也就是电子跃迁的共振吸收的过程；而图 4b 复介电函数实部 $\epsilon_1(\omega)$ 、图 4c 吸收谱和图 4d 光电导率可根据图 4a 复介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 由 Kramers-Kronig 色散关系推导出^[44]。由图 2b 和图 4a 可知，石墨烯和石墨炔在低能量范围内能带急剧变化，表明在低能量范围内电子有效质量小，非局域性强。石墨炔的光子吸收从低能量开始，这与石墨炔的能隙 $\Gamma \rightarrow \Gamma(M_0)$ 并不对应，结合自由载流子吸收发生在低于本征吸收的能量范围内，因此在低于能隙的能量范围内，这种差异是由于导带中的电子和价带中空穴带内跃迁产生了显著的自由载流子吸收造成的。在 K 空间中，跃迁矩阵元可近似处理为常量；并且本研究布里渊区中积分计算采用高对称性的特殊 K 点。因此，本研究中的 K 点也就是其相应联合态密度的奇点；由图 4a 石墨炔在本征吸收区时，复介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 在光子能量为 1.78 和 4.02 eV 达到峰值；对应于图 2b 带间跃迁对称点 $M \rightarrow M(M_1)$ 和 $K \rightarrow K(M_2)$ 。由图 2a 和图 4a 石墨烯复介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 在低能量区随着光子能量的增加不断增大；在本征吸收区当光子能量为 2.14 和 4.05 eV 时达到峰值，对应于图 2a 石墨烯带间跃迁对称点 $M \rightarrow M(L_1)$ 和 $G \rightarrow G(L_2)$ 。结合能带图可以发现，石墨烯和石墨炔的复介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 出现峰值时的光子能量与能带结构中的带隙之间存在一些偏差，这表明电子在跃迁过程中出现了弛

豫现象。复介电函数实部 $\epsilon_1(\omega)$ 表示相位调制即色散；也就是从激发态到稳态释放光子的过程^[45]。通常在零频下静态介电常数(电容率)记为 $\epsilon_1(0)$ ，图 5b 石墨烯和石墨炔的 $\epsilon_1(0)$ 分别为 5.65、7.26，其复介电函数实部随着光子能量的增加而增大，极化程度也不断增加，然后 $\epsilon_1(\omega)$ 再急剧减小，光子能量与介质的电子跃迁形成共振。

图 4c 中石墨烯吸收谱起始于零，吸收强度随光子能量的增加先变大后减小；石墨烯在可见光条件下表现出良好的非线性光学吸收特性。对于石墨炔吸收谱在光子能量为 0.71、1.89、2.71 和 4.14 eV 处达到峰值，与图 4a 复介电函数虚部峰值所对应的光子能量相吻合；而且理论计算的吸收谱峰对应的光子能量与实验值^[31]基本一致。石墨炔的最强吸收峰(光子能量 4.14 eV 处)在近紫外区，其次高峰(波长 656 nm 处)位于可见光吸收区域，其对波长较长的可见光的吸收作用理想，可作为潜在的光催化剂材料。同样光电导率的实部描述了物质对不同能量辐照的光子吸收，对其电导率的影响，光照变化引起材料电导性能的变化称为光电导效应。图 4d 为石墨烯和石墨炔光电导率随光子能量的变化曲线。石墨烯在可见光范围内表现出良好的电导率。光子能量在 0.62、1.79、2.68、2.78 和 4.04 eV 时石墨炔的光电导率达到峰值，与图 4a 复介电函数虚部峰值所对应的光子能量较好吻合，在可见光范围内

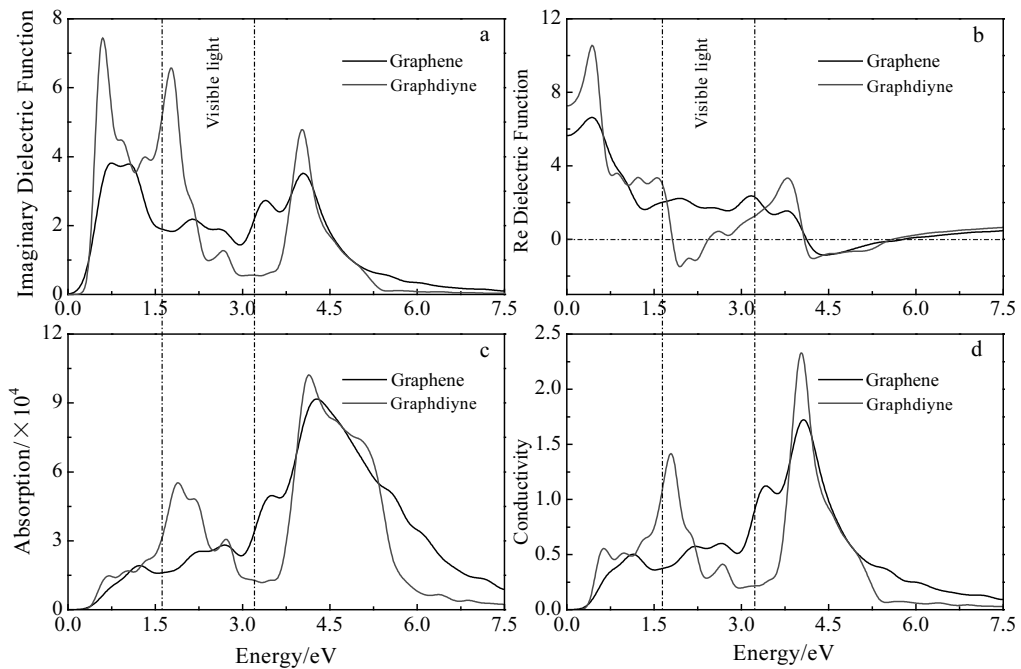


图 4 石墨烯、石墨炔的复介电函数虚部、复介电函数实部、吸收谱及光电导率

Fig.4 Imaginary part (a), and real part (b) of complex dielectric function; absorption function (c) and conductivity (d) of graphene and graphdiyne

(偏红外方向)具有良好的电导率。因此,石墨烯也可应用于光电器件领域。

2.3 其他光学性质

复折射率的实部表示折射率,通过介质在某个入射光频率的折射率,来推断在该频率下介质的透明程度。由图 5a 可知,在可见光范围内,石墨烯在波长为 625 nm 时达到峰值;同时在可见光区域石墨烯的折射率均保持在 1.38 以上,这说明石墨烯是透明的与文献 [19, 20]一致;结合其良好的电导率特性如图 4d 石墨烯可作为制造透明电子器件的材料。对于石墨炔在波长为 760 nm 处达到峰值,结合石墨炔在整个可见光区域内复折射率的实部值可以发现:石墨炔在可见光范围内不是透明的。同时复折射率的虚部是消光系数,

作为表征吸收的光学量,由图 5b 可知,石墨烯和石墨炔的复折射率虚部峰值所对应的光子能量与图 4c 吸收谱自恰,对于石墨炔在入射光波长为 664 nm 时出现极大值,说明其消光效应最强。能量损失谱描述了光电通过均匀介质时能量的损失情况,通常定义为复介电函数的倒虚部,表征材料离子体的共振情况,相应的频率称作等离子共振频率。如图 5c、5d 所示在可见光区下,石墨烯的能量损失谱在光子能量为 2.38 eV 处达到峰值;与其反射率在光子能量为 2.34 eV 处的峰值(11.6%)相对应。因此,可见光区域石墨烯最高可反射 11.6%的入射光,这与在可见光区域石墨烯是透明的^[19,20]相对应。对于石墨炔主要的能量损失峰在 2.15 和 5.38 eV 与其反射谱的急剧下降自恰。

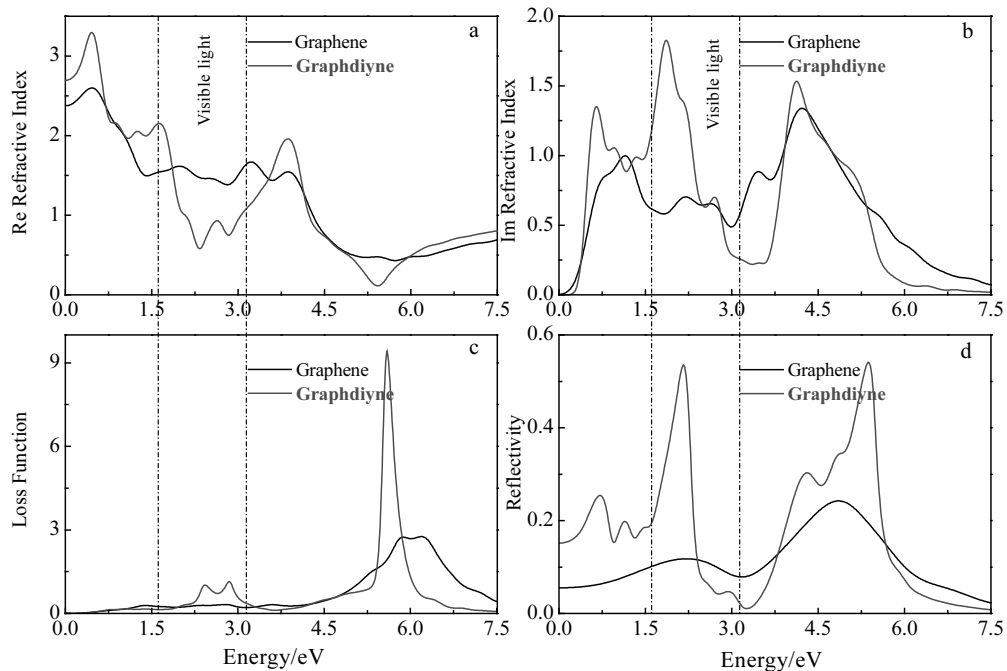


图 5 石墨烯和石墨炔的折射率、消光率、能量损失谱及反射谱

Fig.5 Complex refractive index (a), extinction (b), loss function (c), and reflectivity (d) of graphene and graphdiyne

3 结 论

1) 石墨烯为零隙半导体,碳碳之间以 sp^2 杂化形成强度相同的共价键,石墨炔是能隙为 0.465 eV 的直接带隙半导体,通过 sp 和 sp^2 杂化形成强度不一的共价键,同时石墨烯的稳定性强于石墨炔,并且石墨烯和石墨炔在费米能级附近的电子态主要由 C-2p 态贡献。

2) 在可见光区域石墨烯是透明的,并且表现出良好的非线性光学吸收特性和的电导率,因而可作为制造透明电子器件的理想材料。石墨炔在波长较长的可见光范围内吸收作用理想是潜在的光催化剂材料,同

时它在可见光范围内(偏红外方向)具有良好的电导率可应用于光电器件领域。

3) 在低能量处石墨炔就开始发生吸收,吸收范围没有与带隙值对应,这是因为在低能量范围内存在低于本征吸收的自由载流子吸收,由此可以推测费米能级附近的电子跃迁除了从价带到导带的跃迁外还存在带间跃迁。

4) 石墨烯和石墨炔复介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 出现峰值时的光子能量与能带结构中的带隙之间存在一些偏差,这表明电子在跃迁过程中出现了弛豫现象,证明电子跃迁能量并不是简单的能级差值。

参考文献 References

- [1] Krättschmer W, Lamb L D *et al.* *Nature*[J], 1990, 347(6291): 354
- [2] Iijima S. *Nature*[J], 1991, 354(6348): 56
- [3] Novoselov K S, Geim A K, Dubonos S V *et al.* *Science*[J], 2004, 306(5696): 666
- [4] Li Guoxing, Li Yuliang, Liu Huibiao *et al.* *Chemical Communications*[J], 2010, 46(19): 3256
- [5] Geim A K, Novoselov K S. *Nature Materials*[J], 2007, 6(3): 183
- [6] Dragoman M, Dan N, Dragoman D *et al.* *IEEE Microwave Magazine*[J], 2010, 11(7): 81
- [7] Wu Z S, Zhou G M, Yin L C *et al.* *Nano Energy*[J], 2012, 1(1): 107
- [8] Abraham J, Vasu K S, Williams C D *et al.* *Nature Nanotechnology*[J], 2017, 12(6): 546
- [9] Li C, Li J B, Wu F M *et al.* *Journal of Physical Chemistry C*[J], 2011, 115(46): 23221
- [10] Jang B, Koo J, Park M *et al.* *Applied Physics Letters*[J], 2013, 103(26): 57
- [11] Yang N L, Liu Y Y, Tang Z Y *et al.* *ACS Nano*[J], 2013, 7(2): 1504
- [12] Wu P, Du P, Zhang H *et al.* *Journal of Physical Chemistry C*[J], 2012, 116(38): 20472
- [13] Lin Shang, Buehler M J. *Nanoscale*[J], 2013, 5(23): 11 801
- [14] Du Xu, Skachko I, Barker A *et al.* *Nature Nanotechnology*[J], 2008, 3(8): 491
- [15] Hayashi M, Yoshioka H, Kanda A. *Physica C Superconductivity & Its Applications*[J], 2010, 470(22): S846
- [16] Lin Yuming, Jenkins K A, Valdes-Garcia A *et al.* *Nano Letters*[J], 2008, 9(1): 422
- [17] Li X, Zhu Y, Cai W *et al.* *Nano Letters*[J], 2009, 9(12): 4359
- [18] Wang X, Zhi L J, Müllen K. *Nano Letters*[J], 2008, 8(1): 323
- [19] Kuzmenko A, Van Heumen E, Carbone F *et al.* *Physical Review Letters*[J], 2008, 100(11): 117 401
- [20] Nair R R, Blake P, Grigorenko A N *et al.* *Science*[J], 2008, 320(5881): 1308
- [21] Wang F, Zhang Y, Tian C *et al.* *Science*[J], 2008, 320(5873): 206
- [22] Elias D C, Nair R R, Mohiuddin T *et al.* *Science*[J], 2009, 323(5914): 610
- [23] Ivanovskii A L. *Progress in Solid State Chemistry*[J], 2013, 41(1-2): 1
- [24] Qian X, Liu H, Huang C *et al.* *Scientific Reports*[J], 2014, 5: 7756
- [25] Zhang H, Xia Y, Bu H *et al.* *Journal of Applied Physics*[J], 2013, 113(4): 1831
- [26] Xu Z, Lv X, Li J *et al.* *Rsc Advances*[J], 2016, 6(30): 25 594
- [27] Sun C, Searles D J. *Journal of Physical Chemistry C*[J], 2012, 116(50): 26 222
- [28] Han Z, Zhou L, Wei D *et al.* *Chemical Journal of Chinese Universities*[J], 2014, 35(8): 1731
- [29] Zhang S, Liu H, Huang C *et al.* *Chemical Communications*[J], 2015, 51(10): 1834
- [30] Jin Z, Zhou Q, Chen Y *et al.* *Advanced Materials*[J], 2016, 28(19): 3697
- [31] Luo G, Qian X, Liu H *et al.* *Physical Review B*[J], 2011, 84(7): 2250
- [32] Kuang C, Tang G, Jiu T *et al.* *Nano Letters*[J], 2015, 15(4): 2756
- [33] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J *et al.* *Journal of Physics*[J], 2002, 14(11): 2717
- [34] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. *Physical Review Letters*[J], 1996, 77(18): 3865.
- [35] Vanderbilt D. *Physical Review B Condensed Matter*[J], 1990, 41(11): 7892
- [36] Grimme S, Antony J, Ehrlich S *et al.* *Journal of Chemical Physics*[J], 2010, 132(15): 154 104
- [37] Ceperley D M, Alder B J. *Physical Review B Condensed Matter*[J], 1990, 41(11): 7892
- [38] Hendrik J. Monkhorst, James D. *Physical Review B Condensed Matter*[J], 1976, 13(12): 5188
- [39] Rozhkov A V, Giavaras G, Bliokh Y P *et al.* *Physics Reports*[J], 2011, 503(2-3): 77
- [40] Psofogiannakis G M, Froudakis G E. *Journal of Physical Chemistry A*[J], 2012, 116(36): 19 211
- [41] Dickman S, Senozan N M, Hunt R L. *J Phys Chem C*[J] 1970, 52: 2657
- [42] Puigdollers A R, Alonso G, Gamallo P. *Carbon*[J], 2016, 96: 879
- [43] Pinto H, Markevich A. *Beilstein Journal of Nanotechnology* [J], 2014, 5(5): 1842
- [44] Sheng Xuechu. *The Spectrum and Optical Property of Semiconductor*[M]. Beijing: Science Press, 1992: 76(in Chinese)
- [45] Wooten F. *Optical Properties of Solids*[M]. New York: Academic Press, 1972: 179

First-Principles Study of Electronic Structures and Optical Properties of Two-Dimensional Carbon Materials

Li Yang, Ao Lingyi, Wang Qiang
(Southwest University, Chongqing 400715, China)

Abstract: The electronic structures and optical properties of two-dimensional carbonaceous graphene and graphdiyne were studied based on density functional theory (DFT). The results reveal that the graphene is more stable than the graphdiyne. In the vicinity of Fermi level, the electronic states of graphene and graphdiyne are mainly contributed by the C-2p state. The graphene exhibits better non-linear optical absorption properties and electrical conductivity under the visible light conditions. However, graphdiyne has excellent optical absorption and electrical conductivity in the range of partial infrared light. In addition to the transition from valence-band to conduction-band, there is also the inner-band transition near the Fermi level. The conclusion can provide theoretical basis for the application of two-dimensional carbon material graphene and graphdiyne in optoelectronic devices and photocatalysis.

Key words: graphene; graphdiyne; electronic structures; optical properties

Corresponding author: Wang Qiang, Ph. D., Associate Professor, School of Materials and Energy, Southwest University, Chongqing 400715, P. R. China, E-mail: wysnu@swu.edu.cn