



NiBr₂电子结构和光学性质的第一性原理研究

李世泽^{1,2}, 岑伟富², 杨吟野²

(1. 贵州民族大学物理与机电工程学院, 贵州 贵阳 550025; 2. 贵州民族大学材料科学与工程学院, 贵州 贵阳 550025)

摘要:采用基于密度泛函理论的第一性原理方法,研究单层和块体NiBr₂的电子结构及光学性质。研究表明:自旋向下的单层和块体NiBr₂的导带底和价带顶分别在不同的波矢上,说明他们为间接带隙半导体;自旋向上的单层和块体NiBr₂均是直接带隙半导体,带隙分别为4.25和3.97 eV。由于单层NiBr₂的自旋向上和自旋向下的能带结构不同,由此可知其存在磁性。结合态密度分析可知,块体和单层NiBr₂的价带主要由s态电子贡献,导带主要是由s态和p态电子贡献,而d态电子贡献较低。但是,由于单层NiBr₂未受到层间范德华力的束缚,电子跃迁更活跃,导致在导带中自旋向下的态密度向高能方向移动,从而使带隙增加。当NiBr₂由块体变成单层时,激发能量得到提升,可有效地调控能带结构。光学性质研究结果表明,随着入射光能量的增大,块体NiBr₂位移电流对磁场的贡献率及传导电流对磁场的贡献率整体趋势大于单层NiBr₂。由此可知,单层NiBr₂的电子跃迁概率大于块体NiBr₂。但是,当入射光能量增大到接近10 eV时,位移电流对磁场的贡献率发生转变,并且随着入射光能量的增大,块体NiBr₂的反射率、折射率及吸收率都大于单层NiBr₂。在可见光范围内,块体NiBr₂对光子的吸收能力强于单层NiBr₂,块体NiBr₂和单层NiBr₂分别在能量为12.66和12.55 eV处存在最强吸收峰,峰值分别为 2.99×10^5 和 1.84×10^5 。表明,降低NiBr₂的维度有利于光学性能的提高。

关键词: NiBr₂; 半导体; 态密度; 能带结构; 介电函数; 光电特性; 密度泛函理论; 第一性原理

中图分类号: O469

文献标志码: A

文章编号: 1673-9981(2025)02-0341-07

引文格式:李世泽,岑伟富,杨吟野. NiBr₂电子结构和光学性质的第一性原理研究[J]. 材料研究与应用, 2025, 19(2): 341-347.
LI Shize, CEN Weifu, YANG Yinye. Study on the Electronic Structure and Optical Properties of NiBr₂ Using First-Principles Method[J]. Materials Research and Application, 2025, 19(2): 341-347.

0 引言

随着人类社会、科技、经济的快速发展,资源、能源、自然环境等方面与人类社会发展的矛盾变得日益凸显。为了更好的解决人类发展过程中面临的资源衰竭、材料有效利用率、能源危机和环境污染等问题,以期达到人类与社会、自然和谐相处及发展的目的,部分学者提出了通过有效的利用清洁能源如太阳能,是解决目前人类社会面临的资源、能源和环境问题的有效方法之一。因此,如何提高太阳能利用效率、电荷转移分离效率、光吸收效率等,成为当今的一个热点研究问题。磁性半导体因具备光的吸收、载流子的产生、光电输运、数据存储等优点而备受研究者的关注^[1-3],以期解决能源短缺、信息的存储量、加工以及传输能力的需求。低维磁性半导体材料因具有优异的结构及物理化学性质,一直以来被广泛应用于电子学、光电子学等领域。自人

工成功物理剥离出单原子层的石墨烯以来,以二维材料(如二硫化钨)为研究对象的研究,吸引了国内外研究人员的广泛兴趣和热爱^[4],推动了低维材料的发展^[5-7]。

溴化镍^[8-11]作为一种新型的层状结构磁性半导体材料,表现出本征的长程磁序和丰富且高度可调的磁学现象^[3],在磁性半导体器件领域中有潜在的应用前景。2020年,深圳大学蔡卫山^[5]通过对比不同堆垛方式下的双层NiBr₂和三层NiBr₂的形成能,采用门电压进行调控,发现当电压值达到35 V时双层NiBr₂自旋向下的能带出现导电性,该材料从磁性半导体变为磁性半金属,随着电压值的逐渐增大最终变成磁性金属,在此基础上研究出双层NiBr₂的纳米电子元器件。2021年,湘潭大学尹孟琪^[6]通过湿化学法制备得到NiBr₂材料,并通过改变其相对湿度(RH),发现NiBr₂薄膜具有黄色至绿色的可逆湿致

收稿日期: 2024-07-04

作者简介: 李世泽,硕士研究生,研究方向为电子功能材料。E-mail: 1772778019@qq.com。

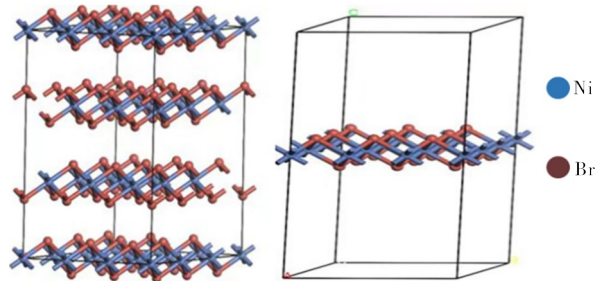
变色行为,该行为的发现与探究,有利于其在湿度传感器领域中进一步的开拓与发展。2022年,王贺岩等^[15]。对磁性半导体NiBr₂的自旋输运特性和光电性质进行了研究,结果表明NiBr₂单层在可见光区域具有较大的光电导率,对蓝光、绿光都具有较强的响应。

目前,对于NiBr₂电子结构、光吸收机制等研究尚未明晰,尤其是单层NiBr₂的电子结构及光学性质的调控机理。本文在第一性原理方法的基础上研究块体NiBr₂和单层NiBr₂的电子结构和光学性质,从材料结构上调控其物性性质。

1 计算模型和方法

1.1 计算模型

图1(a)为块体NiBr₂的原子结构模型。块体NiBr₂的空间群是R3m(群号166),属于六方晶系晶体,晶格常数为 $a=3.68\text{ \AA}$ 、 $b=3.68\text{ \AA}$ 、 $c=18.71\text{ \AA}$,溴化镍晶体表面观形貌为密排结构。块体NiBr₂是一种层状材料,层与层是通过范德华力结合在一起,每一个单胞分别包含一个Ni原子和两个Br原子,形成了3个原子层,一层过渡金属(TM)原子夹在两层卤素原子之间,每个金属原子被6个相邻的卤素原子包围起来,形成的八面体 $[\text{MX}_6]^{4-}$ 单元成六边蜂窝形状,Ni—Br键长为 $2.57\text{ \AA}$ 。图1(b)为单层NiBr₂的原子结构模型。单层NiBr₂是通过剥离块体NiBr₂的原子结构得到的,其中Ni原子和Br原子不在同一平面上。



(a)—块状NiBr₂; (b)—单层NiBr₂。
(a)—bulk NiBr₂; (b)—monolayer NiBr₂。

图1 NiBr₂的结构模型

Figure 1 The atomic structure model of NiBr₂

1.2 计算方法

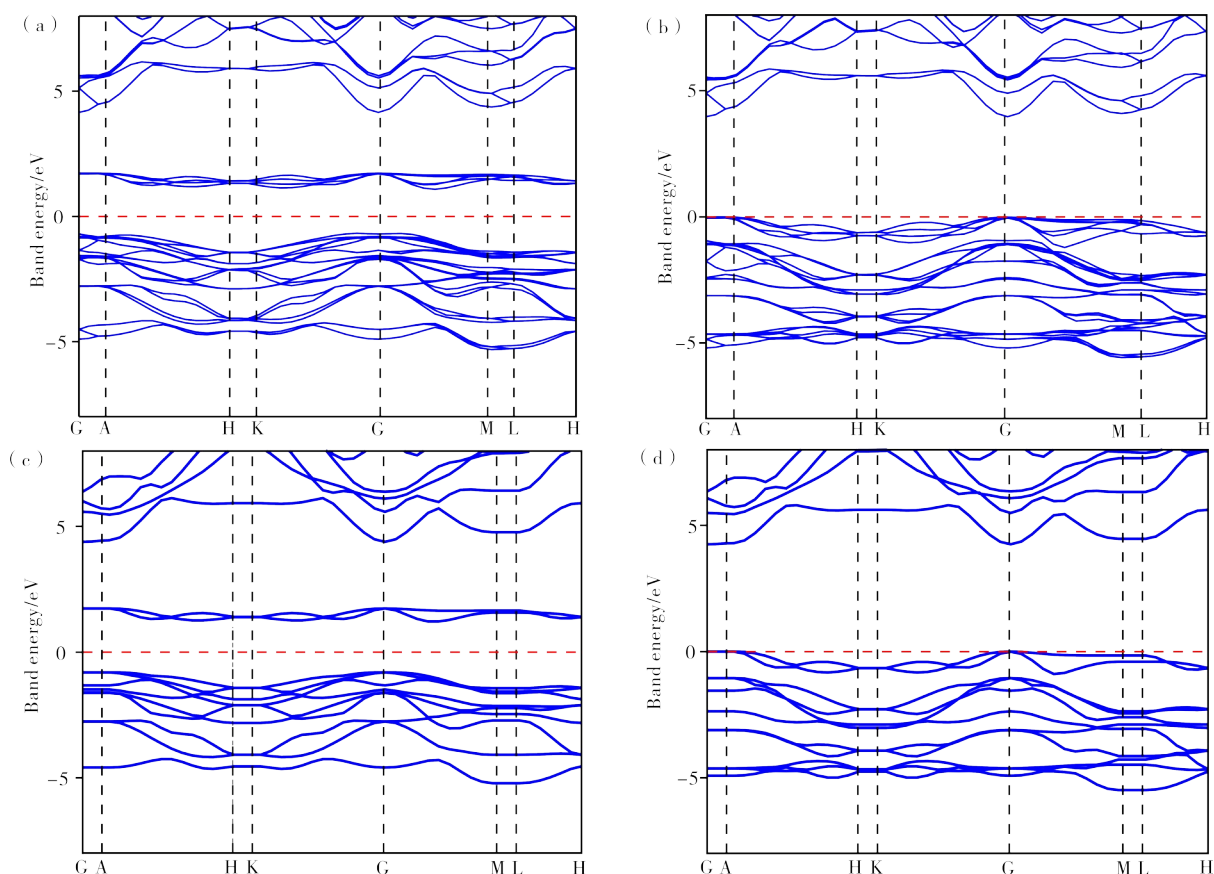
基于密度泛函理论^[8]的第一性原理方法,分别对块体NiBr₂和单层NiBr₂的电子结构、能带结构和电子态密度及光学性质等进行研究,计算由CASTEP (Cambridge serial total energy package)软件包完成^[16-18]。采用BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shannon)方法,对NiBr₂几何结构进行几何

优化^[11]。为了获得能量最低的计算方法,本研究采用GGA (Generalized-gradient approximation)-PBE (Perdew-burke-ernzerhof)近似方法对NiBr₂的几何结构进行优化,得到弛豫的结构,下文所有的计算均在此结构基础上进行。通过收敛性测试,块体NiBr₂的平面波截断能结果表明,当截断能选取为400 eV时,标准网格尺寸为1.75、电子数为72、波段数为8、原子收敛速率为0.1 eV、电荷密度混合为1.5 eV、自旋密度混合矢量 g 为1.5 eV,用于SCF计算的Markpoints网格大小为 $8\times 8\times 2$,单元格约束数为4,电子自旋密度为6(自旋向上的电子数目和自旋向下电子数目的差值)。单层NiBr₂经平面波截断能测试结果表明,当截断能选取为400 eV时,标准网格尺寸为1.75、电子数为72、波段数为8、原子收敛速率为0.1 eV、电荷密度混合为1.5 eV、自旋密度混合矢量 g 为1.5 eV,用于SCF计算的Markpoints网格大小为 $8\times 8\times 2$,单元格约束数为4,电子自旋密度为6(自旋向上的电子数目和自旋向下的电子数目的差值)。

2 计算结果及讨论

2.1 能带结构图

能带结构是分析光电子半导体材料的重要依据。图2为计算得到的块体NiBr₂和单层NiBr₂沿布里渊区高对称点方向的能带结构^[19-20]。从图2(a)可见,自旋向下的块体NiBr₂带隙值 $E_g=1.79\text{ eV}$,禁带宽度在0—4.5 eV之间。表明,自旋向下的块体NiBr₂为半导体材料,导带底与价带顶不在同一个波矢为间接带隙。从图2(b)可见,自旋向上的块体NiBr₂带隙值 $E_g=3.97\text{ eV}$,价带在第G点取得最大值为0 eV,处在费米能级上。表明,自旋向上的块体NiBr₂为半导体材料,导带底与价带顶位于同一个波矢为直接带隙。由于直接带隙半导体的电子在跃迁时不需要吸收或释放出光子(晶格振动),自旋向上的块体NiBr₂可作为发光器件和感光器件的所需材料。由于自旋向上的块体NiBr₂的能带图与费米能级相交,因此可知其为半金属。从图2(c)可见,自旋向下的单层NiBr₂带隙值 $E_g=2.03\text{ eV}$,禁带宽度在0—4.5 eV之间。表明,自旋向下的单层NiBr₂为半导体材料,导带底与价带顶不在同一个波矢为间接带隙。从图2(d)可见,自旋向上的单层NiBr₂带隙值 $E_g=4.25\text{ eV}$,价带在第G点取得最大值为0 eV,处在费米能级上。表明,自旋向上的单层NiBr₂为半导体材料,导带底与价带顶位于同一个波矢为直接带隙。由于自旋向上的单层NiBr₂的能带图与费米能级相交,因此可知其为半金属。



(a)—自旋向下的块体 NiBr₂; (b)—自旋向上的块体 NiBr₂; (c)—自旋向下的单层 NiBr₂; (d)—自旋向上的单层 NiBr₂。
(a)—the spin-down bulk of NiBr₂; (b)—the spin-up bulk of NiBr₂; (c)—the spin-down monolayer of NiBr₂; (d)—the spin-up monolayer of NiBr₂.

图2 NiBr₂的能带结构图

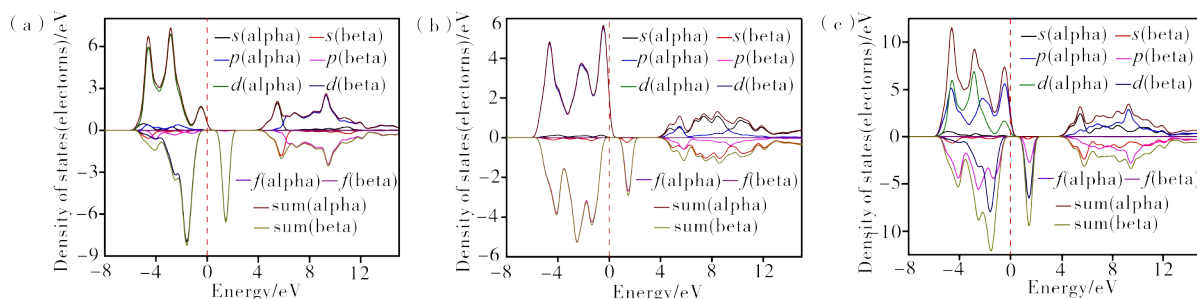
Figure 2 Band structure diagram of NiBr₂

2.2 电子态密度

2.2.1 块体 NiBr₂ 的态密度

态密度分布情况是判断材料性能的重要因素。块体 NiBr₂ 体系中各原子对应电子的态密度如图 3 所示。图 3(a) 和图 3(b) 分别为块体 NiBr₂ 中 Ni 和 Br 的态密度图。从图 3(a) 可见, *s*、*p*、*d* 态 3 类电子在 -15.7—-13.6 eV 能量区间内, 随光电子能量增加其贡献逐渐增大, 达到峰值后又逐渐减小。其中, *p* 态电子为主要贡献电子, *d* 态电子在 -5.8—0 eV 能量区间内为主要贡献电子, 且出现了 3 个峰值, 并在 -2.86 eV 处达到最大值 6.89 eV。由此可知, 在价带中, 能带来源主要为 *d* 态电子。在导带中, 3.7—22.5 eV 能量区间内 *p* 态电子的贡献大于 *s* 态电子的贡献。从图 3(b) 可见: *s* 态电子态密度在 -15.7—-13.6 eV 能量区间, 随着光电子能量增加其贡献增大, 在 -14.40 eV 处的贡献达到最大为 7.94 eV, 随后随着光电子能量的增加其贡献逐渐减

少; 在 -5.9—0 eV 能量区间, *p* 态电子态密度随着光电子能量的增加贡献增大, 且出现 3 个峰值, 其峰值分别为 4.74、3.67、5.54 eV。由此可知, 在价带中 *p* 态电子贡献大于 *s* 态电子。在导带中, 在 3.7—22.4 eV 能量区间内主要贡献是 *s* 态电子和 *p* 态电子, 且 *s* 态电子的贡献度大于 *p* 态电子。图 3(c) 为块体 NiBr₂ 总态密度图, 从图 3(c) 可见: 块体 NiBr₂ 总态密度主要分 3 个区域, 在 -15.7—13.7 eV 能量区间内, 价带的主要贡献是 *s* 态电子, 最大值可以达到 7.61 eV; 在 -5.7—0 eV 能量区间内, 价带的主要贡献是 *p*、*d* 态电子, 且分别出现 3 个峰值, *p* 态电子最大峰值为 5.61 eV, 而 *d* 态电子最大峰值为 6.87 eV; 费米能级被能带穿过, 可知 $E_f \neq 0$, 表明该体系显示金属特性, 具备一定的电子状态, 说明导电性好; 在导带中, 能量区间 3.9—19.2 eV 内的主要贡献是 *s* 态电子和 *p* 态电子, 最大值分别达到 2.43 和 2.88 eV。



(a)一块体NiBr₂中的Ni态密度;(b)一块体NiBr₂中的Br态密度;(c)一块体NiBr₂的总态密度。

(a)—state density of Ni in bulk NiBr₂; (b)—state density of Br in bulk NiBr₂; (c)—total state density of bulk NiBr₂.

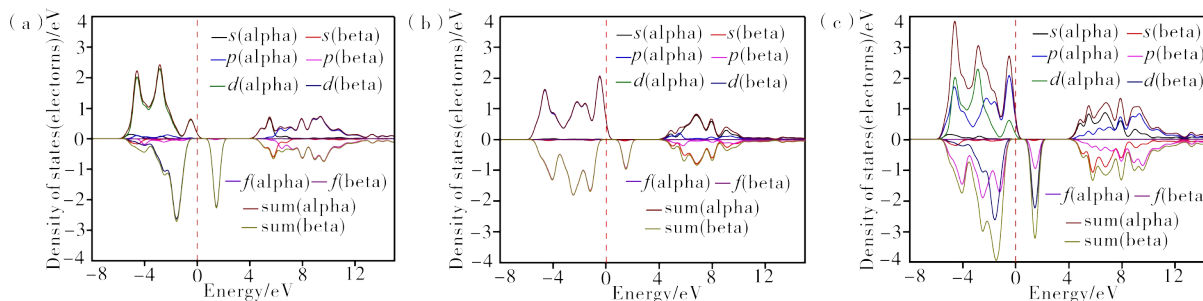
图3 块体NiBr₂的态密度

Figure 3 State density of bulk NiBr₂

2.2.2 单层NiBr₂的态密度

单层NiBr₂体系中各原子对应电子的态密度如图4所示。图4(a)和图4(b)分别为单层NiBr₂中Ni和Br的态密度图。从图4(a)可见:在-15.7—0 eV能量区间,主要由Br-2p电子态为价带做贡献,次之为Ni-2p电子态,其他电子态对价带的贡献相对较小(即各个电子态的面积大小,面积越大贡献越大,面积越小贡献越小);而在0—19.6 eV中主要由Ni-2p电子态为价带做贡献,而Br-2s电子态次之,其他电子态对价带的贡献相对较小。表明,单层NiBr₂的电子特性是于Br-2p和Ni-2p电子态决定的。图4

(c)是单层NiBr₂总态密度图。从图4(c)可见:单层NiBr₂总态密度主要分3个区域,在-15.8—13.6 eV能量区间内,主要由s态电子为价带贡献,最大值可以达到2.69 eV;在-5.7—0 eV能量范围内,d态电子态密度随着光电子能量的增加贡献减少,p态电子态密度随着光电子能量增加贡献增加;费米能级被能带穿过,可知 $E_f \neq 0$,表明该体系显示金属特性;在导带中,在3.9—19.2 eV能量区间,主要贡献是s态电子和p态电子,最大值分别达到0.87和0.84 eV。



(a)—单层NiBr₂中的Ni态密度;(b)—单层NiBr₂中的Br态密度;(c)—单层NiBr₂总态密度。

(a)—state density of Ni in monolayer NiBr₂; (b)—state density of Br in monolayer NiBr₂; (c)—total state density of monolayer NiBr₂.

图4 单层NiBr₂的态密度

Figure 4 State density of monolayer NiBr₂

2.3 光学性质

2.3.1 介电函数

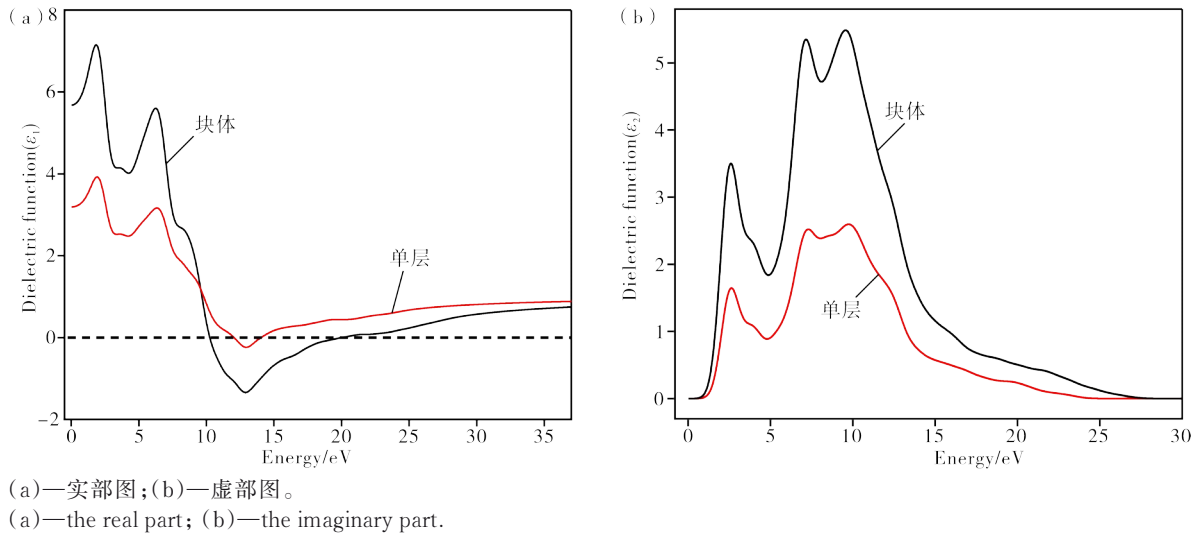
介电函数作为沟通电子在带间进行跃迁时物质的微观物理变化过程与固体电子结构之间的重要桥梁,通过介电函数可以得到其他各种重要的光谱信息。即使电磁波传播不需要介质,但当电磁波传播过程中有介质存在时,需要考虑其对光电子能量吸收的影响,介电函数要用复数来描述。介电函数^[13]由实数部分和虚数部分不同的两部分组成,其物理意义也有所不同。介电函数的实部图反应了位移电流对磁场的贡献率,当介电函数实部越大时,说明物

质对电荷束缚的能力就越强,可以表示材料的绝缘能力特性。当入射光的能量为0 eV时所对应的是静态介电常数。介电函数虚部图表征的是形成电偶极子消耗的能量,代表传导电流对磁场的贡献率,其取决于导带和价带的电子跃迁能,虚部数值越大处于高能级的电子数目就会越多,相对而言电子能够进行跃迁的可能性就越高。

图5(a)为块体NiBr₂和单层NiBr₂的介电函数的实部图。从图5(a)可见,块体NiBr₂的静态常数为5.68。随着入射光子能量增加(增大频率),当能量达到1.84 eV时,静态常数达到最大峰值为7.15;

随着入射光子能量的继续增加,当超过 1.84 eV 时静态常数呈下降的趋势,峰值也在逐渐减小。单层 NiBr_2 的静态常数为 3.19,随着入射光子能量增加到 1.85 eV 时,静态常数达到最大峰值为 3.92;随着入射光子能量的继续增加,当超过 2.0 eV 时静态常数也呈下降的趋势。图 5(b) 为块体 NiBr_2 和单层 NiBr_2 的介电函数虚部图。从图 5(b) 可见:块体 NiBr_2 主要有 3 个吸收峰,随着入射光子能量的增加

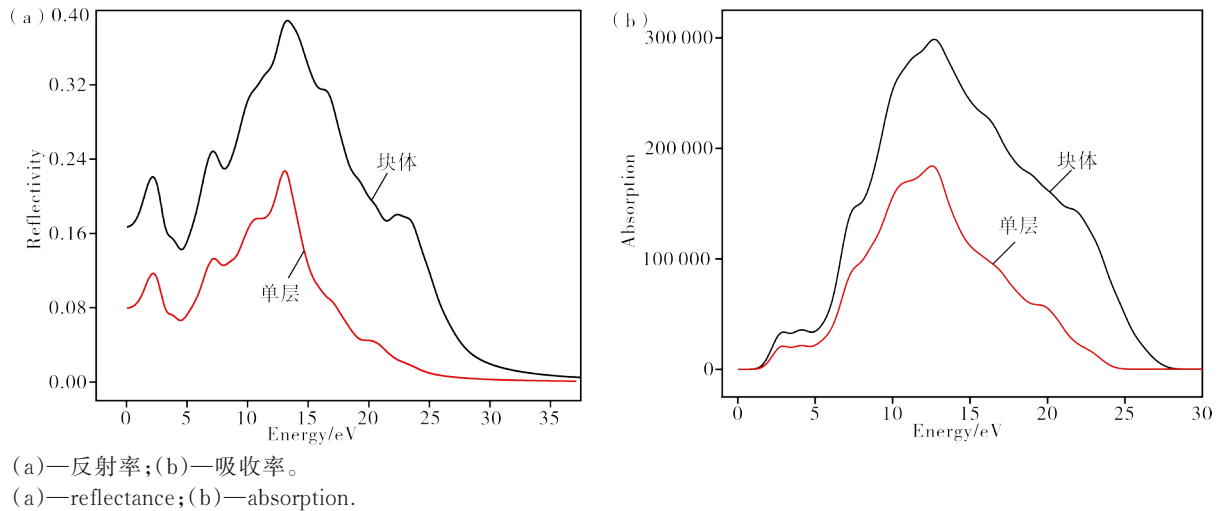
虚部的数值也开始增大,当入射光能量增大到 2.59 eV 时出现第一个峰,其峰值为 3.50;当入射光增大到 9.56 eV 时出现最强吸收峰,其峰值为 5.49,随后便慢慢开始减小。单层 NiBr_2 也是有 3 个主要吸收峰,随着入射光子能量的增加,其虚部的数值也开始增大。当入射光能量增大达到 2.63 eV 时出现第一个吸收峰,峰值为 1.65;当入射光达到 9.71 eV 时,出现最强吸收峰,峰值为 2.60,随后也开始减小。

图5 NiBr_2 的介电函数图Figure 5 Dielectric function of NiBr_2

2.3.2 反射率和吸收率

图 6 为块体和单层的反射率图和吸收系数图^[21-22]。从图 6(a) NiBr_2 的反射率图可见:块体 NiBr_2 主要出现了 4 个反射峰,随着光子能量的逐渐增加,在 13.25 eV 处达到最强反射峰,其峰值为 0.39,随着光子能量的持续增加其反射特性呈现

下降趋势,其峰值最小值为 0.000 326;单层 NiBr_2 主要出现了 3 个反射峰,随着光子能量的逐渐增加,在 13.07 eV 处达到最强反射峰,其峰值为 0.23,随着光子能量的持续增加反射特性呈现下降趋势,其峰值最小值为 0.000 936。

图6 NiBr_2 的反射率和吸收率Figure 6 Reflectance and absorption of NiBr_2

通过吸收系数与介电函数的关系 $\alpha(\omega) = \frac{\omega}{nC} \epsilon_2(\omega)$, 可以得到 NiBr_2 的吸收系数。半导体材料通常能够强烈地吸收入射光的能量, 从而导致电子从低能级向高能级进行跃迁, 跃迁能力的强弱是决定材料用途的重要性质之一。从图6(b) NiBr_2 的吸收率可见: 块体 NiBr_2 在入射光电子能量达到 12.66 eV 时出现最强吸收峰, 其值为 2.99×10^5 , 随着入射光电子能量继续增大吸收峰持续减小, 当能量为 38.48 eV 时吸收峰峰值减小为零; 单层 NiBr_2 对于入射光电子能量低于 0.01 eV 的光不吸收, 在入射光电子能量达到 12.55 eV 时出现最强吸收峰, 其峰值为 1.84×10^5 , 随着入射光电子能量继续增大吸收峰持续减小, 当能量为 35.28 eV 时吸收峰峰值减小为零。

2.3.3 折射率

折射率作为光学常数, 为吸收性介质提供了重要信息, 并反映了其物性性质。折射率可以在一定程度上反映材料的电磁结构在光波作用下的极化性质或光电特性, 以及内部粒子致密性、堆积方式。图7为 NiBr_2 的折射率图。从图7可见: 块体 NiBr_2 在入射光电子能量达到 0.01 eV 时开始具有折射特性, 其折射率大小为 2.38, 随着入射光电子能量的增加出现4个峰值, 前两个峰值比较明显分别是 2.693 和 2.486, 随着入射光电子能量的增大折射特性逐渐减小; 单层 NiBr_2 在入射光电子能量达到 0.01 eV 时开始具有折射特性, 其折射率大小为 1.79, 随着入射光电子能量的增加出现2个峰值分别为 1.99 和 1.84, 随着入射光电子能量的增大折射特性慢慢减弱。

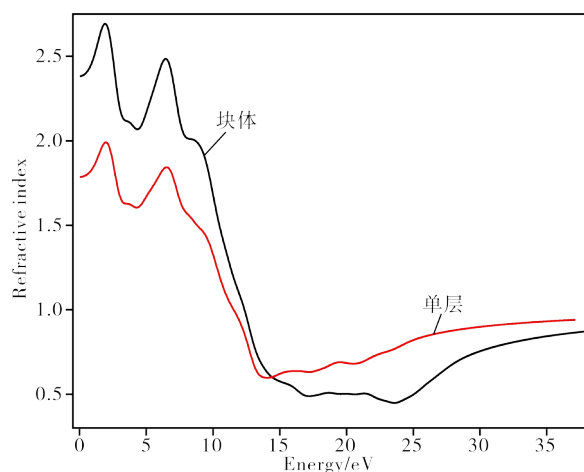


图7 NiBr_2 的折射率

Figure 7 The refractive index of NiBr_2

3 结论

本论文的研究主要是在密度泛函理论的基础上, 运用第一性原理的计算方法, 研究了 NiBr_2 的

子结构和光学性质。

(1) 块体 NiBr_2 和单层 NiBr_2 都为半导体材料, 且都具有一定的金属特性。其中, 块体 NiBr_2 的电子特性主要由 Br-2s 和 Ni-3d 电子态共同决定, 而单层 NiBr_2 的电子特性主要由 Br-2p 和 Ni-2p 电子态共同所决定的。

(2) 在光学性质方面, 块体 NiBr_2 材料电子吸收光子的能力强于单层 NiBr_2 材料, 块体 NiBr_2 和单层 NiBr_2 在能量为 12.66 和 12.55 eV 处均取得最强吸收峰, 且峰值分别为 2.99×10^5 和 1.84×10^5 。同时, 块体 NiBr_2 的电导率也优于单层 NiBr_2 , 但其损失能量较大, 最大损失峰值为 3.11, 而单层 NiBr_2 的最大损失峰只为 1.76。

(3) 块体 NiBr_2 具有天然的层状结构, 与从其剥离的单层 NiBr_2 都具有一定的磁性性质。

参考文献:

- [1] TERVO E J, STEINER M A. Semiconductor-dielectric-metal solar absorbers with high spectral selectivity[J]. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2022, 240: 111735.
- [2] ZHANG X, WANG J C, ANG L K, et al. Designing few-layer graphene Schottky contact solar cells: Theoretical efficiency limits and parametric optimization[J]. Applied Physics Letters, 2021, 118(5): 53103.
- [3] LIU Y, ZHAO J, ZHANG S Y, et al. Advances and challenges of broadband solar absorbers for efficient solar steam generation[J]. Environmental Science: Nano, 2022, 9(7): 2264-2296.
- [4] 刘南舒, 王聪, 季威. 磁性二维材料的近期研究进展[J]. 物理学报, 2022, 71(12): 388-419.
- [5] 蔡卫山. 二维材料的电子结构和输运性质的调控[D]. 深圳: 深圳大学, 2020.
- [6] 尹孟琪. NiBr_2 湿度传感器的湿致变色行为研究[D]. 湘潭: 湘潭大学, 2021.
- [7] 王贺岩, 高怡帆, 廖家宝, 等. 二维 NiBr_2 单层自旋电子输运以及光电性质[J]. 物理学报, 2022, 71(9): 317-326.
- [8] 朱先会, 王甫, 夏杰成, 等. 功能型离子液体协同吸收 NH_3 和 CO_2 的密度泛函理论研究[J]. 化工学报, 2022, 73(10): 4324-4334.
- [9] ADEWALE T, ORUH B. A theoretical and experimental study of the Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) update[J]. Academic Journals, 2013, 6(8): 166-176.
- [10] KHALIL R M A, HUSSAIN M I, IMRAN M, et al. First-principles simulation of structural, electronic and optical properties of cerium trisulfide(Ce_2S_3) compound[J]. Journal of Electronic Materials, 2021, 50(4): 1637-1643.

- [11] KHALIL R M A, HUSSAIN F, HUSSAIN M I, et al. The investigation of optoelectronic, magnetic and dynamical properties of Ce and Ti doped 2D blue phosphorene: a dispersion corrected DFT study [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2020, 827: 154255.
- [12] SEGALL M D, LINDAN P J D, PROBERT M J, et al. First-principles simulation: Ideas, illustrations and the CASTEP code [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, 14(11): 2717-2744.
- [13] 季彬, 赫崇君, 李自强, 等. 铁电晶体 Ba_(1-x)Ca_xTiO₃ 的能带、态密度和光学性质理论研究 [J]. 功能材料, 2022, 53(12): 12021-12027.
- [14] 逯新乐. 类石墨烯二维 N₂P₆ 的改性及其气体传感器性能的第一性原理研究 [D]. 上海: 上海师范大学, 2022.
- [15] 于明鑫. 二维材料边界稳定性与电磁性质的理论研究 [D]. 扬州: 扬州大学, 2022.
- [16] 邓鑫林. 二维材料热输运性质的第一性原理研究 [D]. 武汉: 华中科技大学, 2022.
- [17] GUI G, YUE F, MINYAN L, et al. Arylation of azaarylmethylamines with aryl chlorides and a NiBr₂sub2/sub/NIXANTPHOS-based catalyst [J]. Advanced Synthesis Catalysis, 2017, 359(16): 2890-2894.
- [18] ZHANG L, WANG C, TAI Y, et al. Graphene-supported NiBr₂: A highly efficient and reusable catalyst for the Biginelli reaction [J]. Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 2016, 24(12): 757-761.
- [19] 郑亚鹏. 表面钝化 CsSnI₃ 钙钛矿稳定性及带边能带结构调控理论研究 [D]. 北京: 北京科技大学, 2023.
- [20] 吴侦成, 熊明姚, 文杜林, 等. 空位浓度对纤锌矿 CdS 电子结构和光学性质影响的第一性原理研究 [J]. 人工晶体学报, 2022, 51(12): 2055-2062.
- [21] 薛丽丽, 李洪亮, 卢金铨, 等. La-N 共掺杂闪锌矿 ZnS 的电子结构和光学性质 [J]. 稀土, 2021, 42(4): 27-34.
- [22] 叶建峰, 秦铭哲, 肖清泉, 等. Ti, V, Co, Ni 掺杂二维 CrSi₂ 材料的电学、磁学及光学性质的第一性原理研究 [J]. 物理学报, 2021, 70(22): 281-297.
- [23] 刘兆肃, 刘国濠, 叶晓宜, 等. 二硫化钨二维材料制备及其表面增强拉曼散射性能研究 [J]. 材料研究与应用, 2021, 15(5): 486-495.

Study on the Electronic Structure and Optical Properties of NiBr₂ Using First-Principles Method

LI Shize^{1,2}, CEN Weifu², YANG YinYe²

(1. School of Physics and Mechanical and Electronic Engineering, Guizhou Minzu University, Guiyang 550025, China; 2. School of Materials Science and Engineering, Guizhou Minzu University, Guiyang 550025, China)

Abstract: The electronic structure and optical properties of monolayer and bulk NiBr₂ are studied by first-principles methods which based on density functional theory. The result show that the conduction band edge and valence band of spin-down monolayer and bulk NiBr₂ are indirect bandgap semiconductors. In contrast, both the spin-up monolayer and bulk NiBr₂ are direct bandgap semiconductors with bandgaps of 4.25 eV and 3.97 eV, respectively. Moreover, the spin-down band structure is different from spin-up band structure, it shows that monolayer NiBr₂ is magnetic. State density analysis shows that the valence band of bulk NiBr₂ is mainly contributed by *s*-state electrons, and the conduction band is mainly contributed by *s*-state and *p*-state electrons, the *d*-state electron contribution is least, however because monolayer NiBr₂ is not bound by the interlayer Van der Waals forces, bring about in the conduction band, the spin-down state density moves towards the high energy, resulting an increased band gaps. Indicating that when NiBr₂ changes from a bulk to a monolayer, the excitation energy is improved and the band structure is effectively regulated. The optical properties show that: With the increase of incident light energy, the contribution rate of the bulk NiBr₂ displacement current to the magnetic field and the contribution rate of the conduction current to the magnetic field as a whole tend to be larger than that of the monolayer NiBr₂, so the electron transition probability of the monolayer NiBr₂ is larger than that of the bulk NiBr₂, however, when the incident light energy increases to nearly 10eV, the contribution of the displacement current to the magnetic field changes. With the increase of incident light energy, the reflectivity, refractive index and absorptivity of bulk NiBr₂ are higher than those of monolayer NiBr₂, the absorption capacity of bulk NiBr₂ on photons is stronger than that of monolayer NiBr₂ in the visible light range. Bulk NiBr₂ and monolayer NiBr₂ have the strongest absorption peaks at energies of 12.66 eV and 12.55 eV, with peaks of 2.99×10^5 and 1.84×10^5 , it shows that reducing the dimensionality of NiBr₂ is beneficial to improve its optical properties.

Keywords: NiBr₂; semiconductor; density of states; band structure; dielectric function; photoelectric properties; density function theory; first-principles

(学术编辑: 常成)