

# 低维 h-BCN 纳米材料电子结构及电输运特性研究



李燕, 熊诵博, 管志勇, 杨宁, 刘英\*

江西理工大学能源与机械工程学院, 江西南昌 330013

**摘要:** 随着后摩尔时代演进, 新型二维材料的引入推动了自旋电子学的发展。近期实验上合成的六方硼碳氮 (h-BCN) 单层表现出引人入胜的电子特性, 这极大引起了研究人员的兴趣。本文采用基于第一性原理的密度泛函理论结合非平衡格林函数的计算方法, 研究了二维 h-BCN 纳米片和一维 h-BCN 纳米带的电子结构和电输运特性。二维 h-BCN 单层不仅具有与石墨烯和氮化硼 (h-BN) 相同的六边形结构, 从能带结构上看还呈现出带隙值为 1.17 eV 的半导体特性。此外, 锯齿型 (Z 型) h-BCN 纳米带的带隙变化与带宽相关, 而扶手椅型 (A 型) h-BCN 纳米带的带隙变化与带宽无关。在此基础上, 进一步构建了基于 Z 型 h-BCN 纳米带的器件模型。不同带宽的 Z 型 h-BCN 纳米带器件的输运性质与自旋方向有关, 从伏安特性曲线上看表现出完美的负微分电阻 (NDR) 效应。最后, 通过对局域态密度的分析深入了解量子输运的内部机理。研究结果表明, 二维 h-BCN 纳米片具有直接半导体行为, Z 型 h-BCN 纳米器件的与自旋相关的输运特性和 NDR 效应对设计多功能自旋纳米器件中具有重要的意义。

**关键词:** 电子特性; 输运特性; 第一性原理; 密度泛函理论

**DOI:** [10.57237/j.mater.2023.04.002](https://doi.org/10.57237/j.mater.2023.04.002)

## Study on the Electronic Structure and Electrical Transmission Characteristics of Low-dimensional h-BCN Nanomaterials

Yan Li, Songbo Xiong, Zhiyong Guan, Ning Yang, Ying Liu\*

School of Energy and Mechanical Engineering, Energy Materials Computing Center, Jiangxi University of Science and Technology, Nanchang 330013, China

**Abstract:** As the post-Moore era evolves, the introduction of novel two-dimensional materials has boosted the development of spintronics. Recently experimentally synthesized hexagonal boron carbon nitrogen (h-BCN) monolayers exhibit intriguing electronic properties, which have greatly attracted the interest of researchers. In this paper, the electronic structure and electrical transport properties of two-dimensional h-BCN nanosheets and one-dimensional h-BCN nanoribbons are investigated using first-principles-based density-functional theory combined with nonequilibrium Green's function calculations. The 2D h-BCN monolayers not only have the same hexagonal structure as

基金项目: 江西省教育厅青年科技项目 (GJJ210841); 江西省大学生创新创业教育计划项目 (S202110407033).

\*通信作者: 刘英, 9520200009@jxust.edu.cn

graphene and boron nitride (h-BCN), but also exhibit semiconducting properties from the energy band structure with a band gap value of 1.17 eV. In addition, the bandgap variation of the sawtooth-type (Z-type) h-BCN nanoribbons is correlated with the bandwidth, while that of the armchair-type (A-type) h-BCN nanoribbons is independent of the bandwidth. On this basis, the device model based on Z-type h-BCN nanoribbons is further constructed. The transport properties of the Z-type h-BCN nanoribbon devices with different bandwidths are related to the spin direction, and exhibit perfect negative differential resistance (NDR) effect from the voltammetric characteristic curves. Finally, the internal mechanism of quantum transport is deeply understood by analyzing the local density of states. The results show that the two-dimensional h-BCN nanosheets have direct semiconductor behavior, and the spin-dependent transport properties and NDR effect of the Z-type h-BCN nanodevices are of great significance in the design of multifunctional spin nanodevices.

**Keywords:** Electronic Property; Transport Property; First Principle; Density Functional Theory

## 1 引言

碳元素在自然界中十分常见，其存在形式多种多样，碳的有机物更是生命之本。碳的多种同素异形体已经在各方面研究领域大放异彩，如金刚石、石墨、石墨烯、富勒烯等。其中，自从 2004 年被 Geim 等人从石墨中成功剥离石墨烯后薄片[1]，其作为一种由 sp<sub>2</sub> 杂化碳原子组成的蜂窝状的二维材料越来越受到研究者的欢迎。由于石墨烯优异的电子学特性[2]，使其广泛应用于纳米器件等领域。Sarama 等人将石墨烯和二维半导体（异质结等）的运输特性进行比较，并且对单层石墨烯在运输的各方面性质做出了合理的解释[3]，间接说明双层石墨烯和石墨烯纳米带还有很大开发的潜力。近年来对石墨烯的研究已经达到顶峰之后，进而研究人员将注意力转移到与卤族元素相关的材料。高瑞玲等人研究了掺杂硼氮的石墨烯的原子结构和电子特性[4]，研究发现掺杂的元素对石墨烯的电子特性改变不大，在这之后研究人员倾向于研究其他新型二维材料。

受到石墨烯奇妙特性的影响，氮化硼（BN）引起了大家的关注。BN 是一种性能优良的宽带隙复合材料，具有高导热、结构稳定和抗氧化能力好等性能[5-8]，应用前景十分广阔。此外，与石墨烯结构类似的六方氮化硼（h-BN）更受到大家的欢迎。2005 年，Geim 团队首次在实验上制备得到了 h-BN 薄片[9]，从那以后，h-BN 材料因其具有良好的绝缘、化学稳定和热稳定等特性而备受关注。

在石墨烯和 h-BN 材料表现出优异的特性之后，Sumit Beniwal 团队成功合成了 h-BCN，并且基于第一性原理计算出 h-BCN 具有介于石墨烯和 h-BN 之间的直接带隙[10]。Yunshuai Bi 等人成功合成了层间杂化的

h-BCN，其带隙小于 h-BN [11]，半导体性质更加优秀。Heena Garg 团队研究了 h-BCN 的光活性，证明了其在环境修复方面的潜力[12]。大量的研究成果表明 h-BCN 材料发展前景一片光明，它完美地结合了石墨烯与 h-BN 的特性，极大地促进了二维材料的发展。随着对电子器件的要求逐渐提高，制备低维 h-BCN 方法简单、高稳定性等特点使其成为制备电子器件的候选材料。

本文首先基于第一性原理研究了二维 h-BCN 的电子特性，然后将二维 h-BCN 通过裁剪得到一维的 Z 型和 A 型纳米带，接着将不同类型纳米带的特性进行对比，最后选取性能优异的纳米带制备自旋纳米器件并研究其运输特性，该研究对自旋纳米器件的发展有积极作用。

## 2 模型与计算方法

研究工作基于密度泛函理论 (DFT) 结合非平衡格林函数 (NEGF) 方法在第一性原理软件包 SISETA 中进行计算[13]。首先对所有的结构进行弛豫和优化处理[14-16]。采用广义梯度近似 (GGA) 的 Perdew-Burke Ernzerhof(PBE) 泛函理论来解释交换的相关相互作用。使用  $11 \times 11 \times 1$  的 K 点采样网格，对二维 h-BCN 单层的结构进行弛豫和电子结构计算。在计算过程中，将截至能量设置为 500 eV。对于 Z 型和 A 型 h-BCN 纳米带的研究，通过加氢钝化与构成重读单元来组成器件模型（如图 4 所示），所有的器件都由三个部分组成：左电极、中心散射区和右电极。对于纳米器件的研究，使用第一性原理软件包 SISETA 计算其运输特性、伏安

特性和局域态密度, 在以上的计算中设定费米能级为 0 eV。在输运计算前, 由优化后的分子结构组成的器件再次进行了优化。在输运特性计算方面, 将截止能量定义为 150 Ry, 电子温度设定为 300 K。在特定的偏置电压下, 系统的自旋极化透射系数  $T^{\uparrow(\downarrow)}(E)$  为:

$$T^{\uparrow(\downarrow)}(E) = T_\gamma \left[ \Gamma_L G^R \Gamma_R G^A \right]^{\uparrow(\downarrow)} \quad (1)$$

其中  $G^R$  和  $G^A$  分别表示延迟格林函数和高级格林函数,  $\Gamma_L$  和  $\Gamma_R$  分别表示左右电极自能虚部的耦合函数。将上述式(1)代入可得器件自旋的电流电压特性, 根据 Landauer-Buttiker 公式:

$$I^{\downarrow(\uparrow)}(V_b) = \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} T^{\downarrow(\uparrow)}(E, V_b) [f_L(E - \mu_L) - f_R(E - \mu_R)] dE \quad (2)$$

其中,  $\hbar$ 、 $e$  和  $f(E)$  分别表示普朗克常数、基本电荷和费米-狄拉克分布函数。 $\mu_L$  和  $\mu_R$  分别表示左右

电极的化学势。

### 3 结果与讨论

为了初步了解 h-BCN 的性能, 首先研究了二维 h-BCN 单层的几何结构和电子特性。图 1(a)显示了二维 h-BCN 单层纳米片在顶部和横向视图下的几何形状, 其宽度沿扶手椅方向和锯齿方向分别用 NA 和 NZ 标记。图中, B、C 和 N 原子分别用粉色、灰色和蓝色来表示。图中可以清楚地发现二维 h-BCN 单层具有六方结, 这与 h-BN 的结构十分相似。图 1(b)展示了二维 h-BCN 单层的电子能带结构, 其中价带最大值 (VBM) 和导带最小值 (CBM) 都位于在布里渊区 (BZ) 的  $\Gamma$  点, 采用 PBE 泛函方法用 SISSETA 软件包计算得到的带隙值为 1.17 eV, 证明了二维 h-BCN 单层表现出直接带隙的半导体性质。二维 h-BCN 单层的半导体特性对制作半导体器件起到支撑作用[17]。

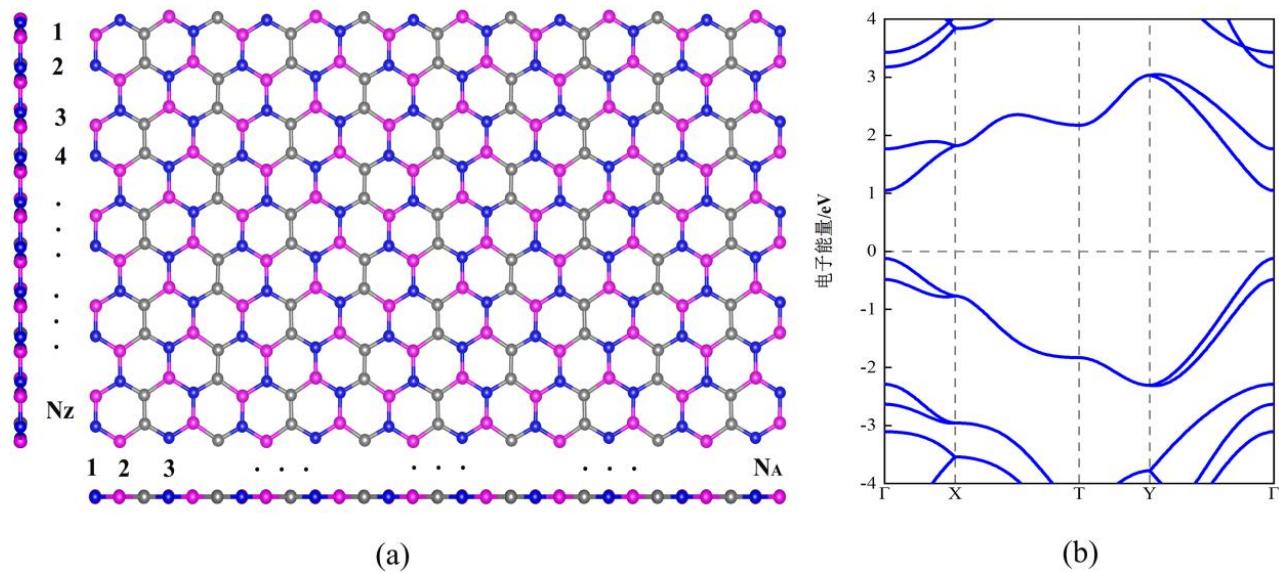


图 1 二维 h-BCN 的(a)几何结构和(b)能带结构的示意图

Figure 1 Schematic diagram of (a) geometric structure and (b) band structure of two-dimensional h-BCN

近年来, 随着石墨烯纳米带卓越的特性被发掘出来, 越来越多的研究人员对一维纳米条带展开了深入的研究。为了确切地了解 h-BCN 的性质, 可以将二维 h-BCN 纳米片沿着不同方向进行剪裁, 然后得到了不同宽度的一维 Z 型和 A 型纳米条带。此外, 还可以使用 H 原子对纳米条带的边缘进行钝化处理, 从而研究边缘原子对一维纳米带电子性质的影响。为了便于阐述, 将宽度为 9 的 A 型 h-BCN 纳米带命名为 A9, 如图 S1(a)所示; 经

过 H 原子钝化后的 A9 命名为 A9H, 如图 S1(b)所示; 将其宽度为 6 的 Z 型 h-BCN 纳米带命名为 Z6, 如图 S1(c)所示; 经过 H 原子钝化后的 Z6 命名为 Z6H。在图 S1 下半部分展示的电子能带结构中, A9 和 A9H 都表现出半导体特性, 其带隙值分别为 1.81 eV 和 1.83 eV。与之相反, Z6 与 Z6H 的能带结构均跨越了费米能级, 而表现出导电性良好的金属特性。这些结果表明 H 原子钝化边缘对一维 h-BCN 纳米带的电子结构影响较小, Z 型与

A 型 h-BCN 表现出不同的导电特性可以归因于沿不同

方向的电子输运能力不同[18]。

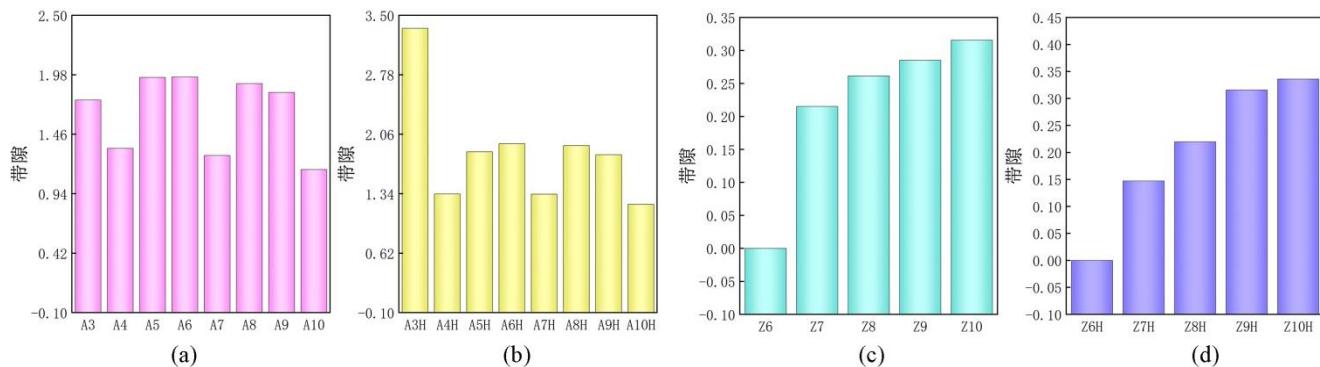


图 2 (a) A3 至 A10、(b) A3H 至 A10H、(c) Z6 至 Z11 和(d) Z6H 至 Z10H 带隙柱状图

Figure 2 Band gap histogram of (a) A3 to A10, (b) A3H to A10H, (c) Z6 to Z11 and (d) Z6H to Z10H

为了进一步了解 A 型和 Z 型 h-BCN 纳米带的电子性质, 对 A 型和 Z 型不同宽度的一维 h-BCN 纳米条带进行了相应地研究计算, 最后绘制了 A 型和 Z 型 h-BCN 纳米带在不同宽度下以及经过 H 原子钝化后的带隙值变化图, 结果如图 2 的柱状图所示。图 2(a)绘制的是 A3~A10 的带隙变化柱状图, 图 2(b)展示了 A3~A10 钝化后的 A3H 至 A10H 的带隙变化柱状图; 图 2(c)为 Z6~Z11 的带隙变化柱状图, 图 2(d)为钝化后的 Z6H~Z10H 的带隙变化柱状图。从柱状图中可看出, 沿扶手椅方向得到的 A3~A10 的带隙值没有规律性变化, 而且均表现出半导体性质。与此同时, A3H~A10H 的带隙值也没有规律性变化, 且均表现为半导体性质, 这再次证明了 H 原子钝化边缘对于 h-BCN 纳米带的电子性质影响较小。然而, Z 型 h-BCN 纳米条带随着条带宽度的增加, 从 Z6 的带隙值为零开始带隙逐渐递增。从带隙值上看, Z 型 h-BCN 纳米条带与二维 h-BCN 单层的能带结构性质趋于一致, 都表现为半导体性质。无独有偶, 经过 H 原子钝化后的 Z 型 h-BCN 纳米条带的带隙值随宽度增加而从零开始逐渐增大, 而且均表现为半导体特性。对于 Z 型 h-BCN 纳米条带来说, 条带宽度越宽, 带隙就越宽, 导电能力就越弱, 这是由于条带宽度的增加导致在 h-BCN 纳米带的电荷传输能力随带隙宽度的增加而逐渐减弱, 进而造成导电能力减弱[19]。带隙的大小决定着电导率的大小, 带隙值越大, 电子由价带激发到导带就越难, 电导率就越低, 这就意味着设计器件时需要选择合适的条带长度来满足导电性能要求。

为了找到合适长度的纳米条带来自旋纳米器

件, 从电子特性更好的 Z 型纳米带出发, 研究计算了 Z7、Z6H 和 Z7H 在自旋下和非自旋下的能带结构, 如图 3 所示。Z7、Z6H 和 Z7H 纳米带的几何结构分别展示在图 3 的(a)、(b)和(c)中。从图 3 的(a)和(b)中可知, Z7 和 Z6H 在自旋下的能带结构均跨越了费米能级, 而在自旋下表现出良好的金属特性。同样的, 图 S2(a)和(c)中的 Z7 和 Z7H 在非自旋下的能带跨越了费米能级, 也表现出了金属特性。与次相对的, 图 3(c)中 Z7H 在自旋下的能带和图 3(b)中的 Z6H 在非自旋下的能带都表现为半导体特性, 其带隙值分别为 0.147131 eV 和 0.063558 eV。计算结果表明, 这些纳米带的能带结构在非磁性状态下表现出金属性质, 在铁磁态下具有明显的自旋分裂。Z6H 纳米带在外加横向磁场下由半导体特性变为金属特性, 而 Z7H 纳米带由金属特性变为半导体特性。因此, 这些纳米带在电极材料中具有重要的应用, 可以应用于构建自旋纳米器件。

在了解 Z 型 h-BCN 条带随宽度变化的电子性质的基础上, 构建了 4 种纳米器件来研究它们在电荷输运中的自旋依赖特性, 设计的器件模型如图 4 所示。这些器件均由三部分区域组成, 分别为左电极区、中间散射区和右电极区。其中, 中间散射区是由左右两侧周期性延伸构成的。图 4(a)是左右两侧均由 Z6H 构建而成的器件模型, 图 4(b)是由左侧 Z7H 和右侧 Z6H 构建而成的器件模型, 图 4(c)和图 4(d)分别是左右两侧均为 Z7H 和 Z7 构建而成的器件模型。为方便说明, 图中将 4 种纳米器件分别命名为 Z6H-Z6H、Z7H-Z6H、Z7H-Z7H 和 Z7-Z7。

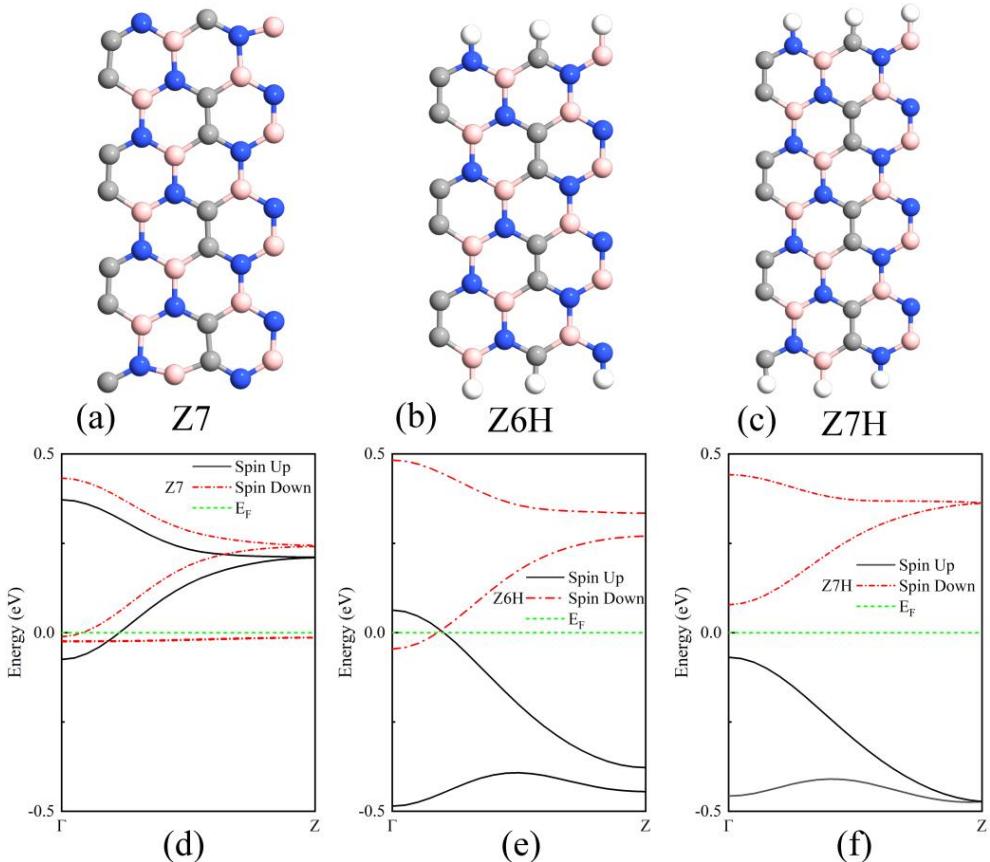


图 3 (a) Z7、(b) Z6H 和(c) Z7H 的几何结构图, (d) Z7、(e) Z6H 和(f) Z7H 的能带结构的示意图

Figure 3 Geometric structure diagram of (a) Z7, (b) Z6H and (c) Z7H, schematic diagram of band structure of (d) Z7, (e) Z6H and (f) Z7H

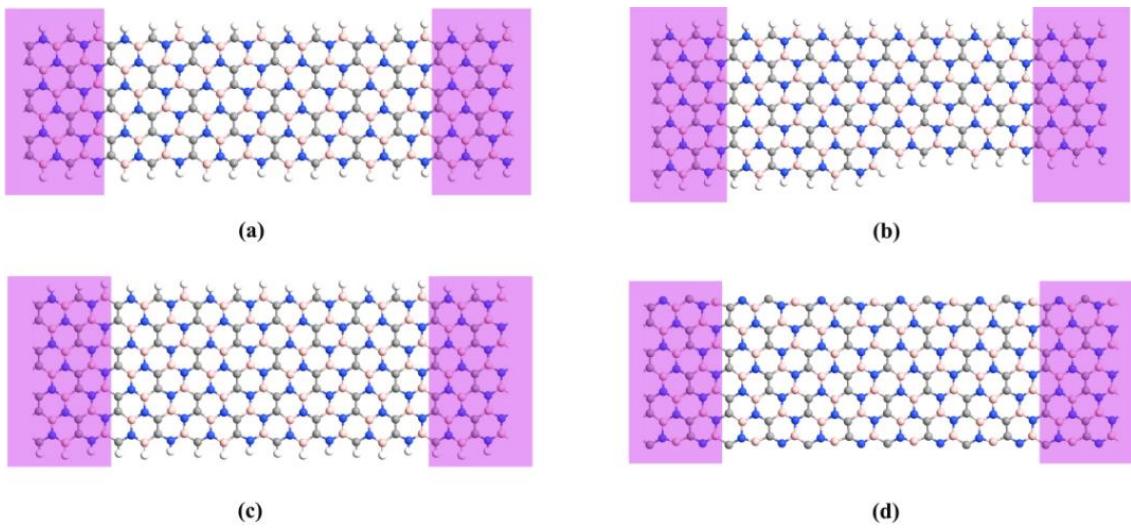


图 4 (a) Z6H-Z6H、(b) Z7H-Z6H、(c) Z7H-Z7H 和(d) Z7-Z7 器件模型示意图

Figure 4 The device model diagram of (a) Z6H-Z6H, (b) Z7H-Z6H, (c) Z7H-Z7H and (d) Z7-Z7

如图 5(a)~(d)所示, 研究了这四种器件在零偏压下的电子输运透射谱来进一步了解它们的输运特性, 。从图 5(a)Z6H-Z6H 器件的输运透射谱图中, 可以看出

在费米能级附近无论是自旋向上还是自旋向下传输通道, 都出现了强且宽的峰值, 这意味着电子可以很容易地通过器件, 因此证明了该器件有良好的导电性能。

而图 5(b)Z7H-Z6H 器件的输运透射谱图与之相反, 自旋向上和自旋向下的输运系数在费米能级附近被完全抑制, 这表明通过该器件的电子受到严重抑制, 因而该器件的导电能力较弱。Z7H-Z7H 器件的输运透射谱表现出与 Z7H-Z6H 器件类似的现象, 其在费米能级附近的输运系数突降至 0, 同样说明了该器件的导电能力较弱。Z7H-Z7H 器件的输运透射谱表现出与 Z7H-Z6H 器件类似的现象, 其在费米能级附近的输运系数突降至 0, 同样说明了该器件的导电能力较弱。从图

5(d)Z7-Z7 器件的输运透射谱中, 可以看出自旋向上的传输通道在费米能级附近呈现出宽而强的峰值, 而自旋向下的在费米能级附近被完全抑制。这意味着自旋向上的电子很容易地通过器件, 而自旋向下的电子则被严重遏制, 该器件表现出单自旋导电特性[20]。因此可以选择合适宽度的一维纳米带构成纳米器件来满足实际应用中对导电性能的需要, 这为今后开发新型纳米器件提供了有利的参考。

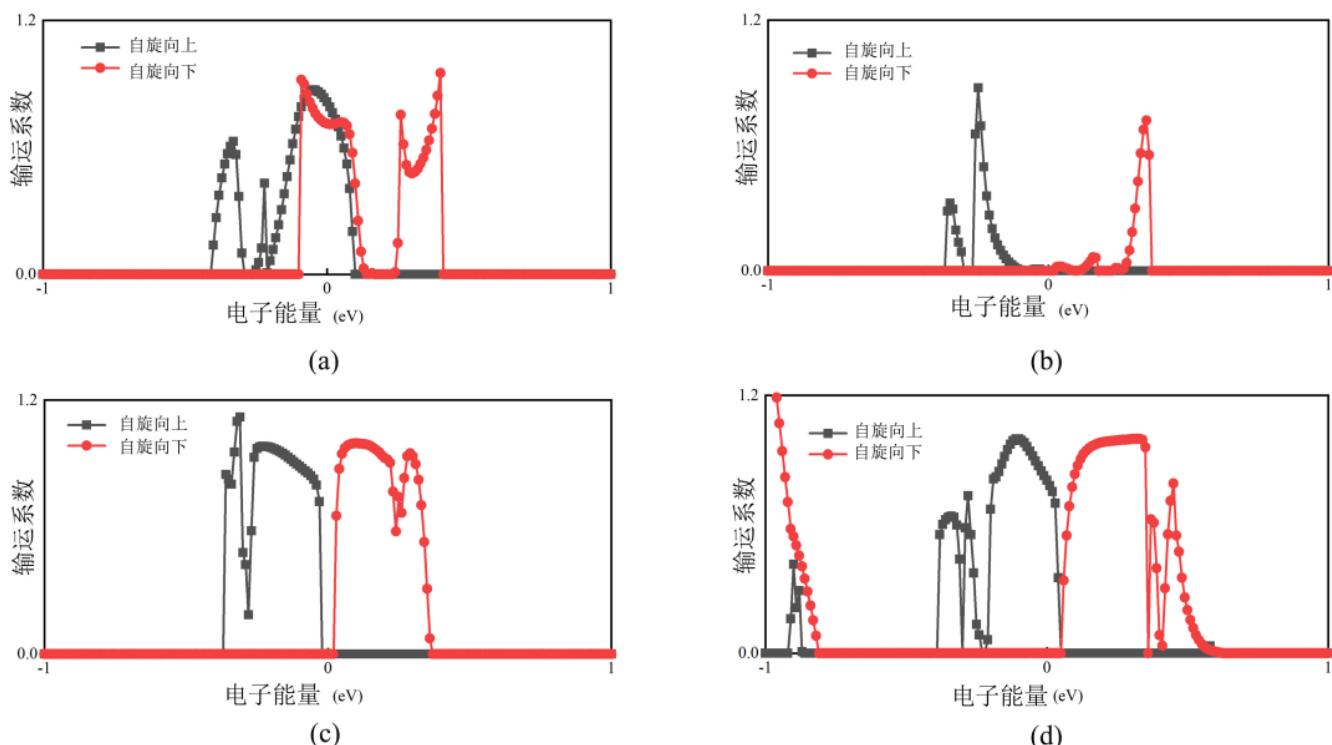


图 5 (a) Z6H-Z6H 输运透射谱图, (b) Z7H-Z6H 输运透射谱图, (c) Z7H-Z7H 输运透射谱图和(d) Z7-Z7 输运透射谱图

Figure 5 The transmission spectrum diagram of (a) Z6H-Z6H, (b) Z7H-Z6H, (c) Z7H-Z7H and (d) Z7-Z7

如图 6 所示, 计算了这四种纳米器件在不同偏置电压下的自旋依赖电流, 并绘制了非线性伏安 (I-V) 特性曲线。选取的偏置电压范围是-1.0~1.0 V, 每隔 0.2 V 偏置电压取点, 这样可以更清晰地了解自旋纳米器件的 I-V 特性[21]。从图 6(a)和(c)中, Z6H-Z6H 和 Z7H-Z7H 器件表现出完美的关于原点对称的脉冲式 I-V 行为, 而从图 6(b)和(d)中, Z7H-Z6H 和 Z7-Z7 器件却显示出差异的非对称脉冲式 I-V 行为。对于 Z6H-Z6H 器件而言, 自旋向上与自旋向下的电流在负偏压-0.6~0.2 V 和正偏压 0.2~0.6 V 范围内随着偏压的增大而逐渐减小, 体现出明显的 NDR 效应。在-0.2 V 偏压下自旋向上的电流达到最小值 -2.81 μA, 在

-0.4~0.4 V 范围内电流保持较大数值这与图 5(a)的输运透射谱所呈现的结果相同。Z7H-Z6H 器件的自旋向上与自旋向下的电流随电压变化关系不显著, 在 0.4 V 偏压下自旋向下的电流达到最大值 108 nA。从数量级上看偏压范围内的电流值都很小, 这与图 5(b)所呈现的输运性质一致。Z7H-Z7H 器件的自旋向上和自旋向下的电流在小范围内有 NDR 效应, 在-0.2 V 偏压处自旋向上的电流达到最小值 -292 nA。Z7-Z7 器件的自旋向上的电流在低偏压范围内出现较大数值, 而自旋向下的电流在-0.8~0.8 V 偏压范围内几乎为 0, 这与图 5(d)中自旋向上的光谱在费米能级处有较强的吸收峰和自旋向下的光谱却被抑制对应上。

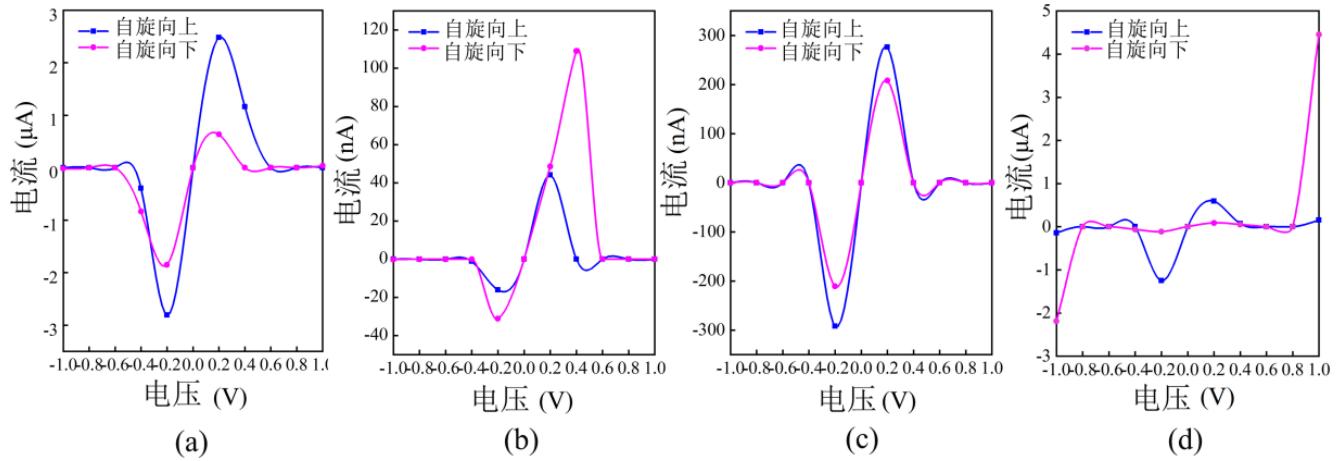


图 6 (a) Z6H-Z6H 的伏安特性曲线图, (b) Z7H-Z6H 的伏安特性曲线图, (c) Z7H-Z7H 的伏安特性曲线图和(d) Z7-Z7 的伏安特性曲线图

Figure 6 The I-V characteristic diagram of (a) Z6H-Z6H, (b) Z7H-Z6H, (c) Z7H-Z7H and (d) Z7-Z7

如图 7 所示, 计算了 Z6H-Z6H、Z7H-Z7H 和 Z7H-Z6H 器件的自旋局域态密度以进一步分析电流如何传输。Z6H-Z6H 和 Z7H-Z6H 器件的等密度面设置为 0.01 a.u., Z7H-Z7H 器件的等密度面设置为  $1 \times 10^{-6}$  a.u.。Z6H-Z6H 的自旋向上与自旋向下的电子均能完美地被输送通过整个器件, 而 Z7H-Z7H 器件在自旋向上与自旋向下通道下的电子局域在边缘部分区域, 无法在整个

一个器件上构成通路。Z7H-Z6H 器件无论是自旋向上还是自旋向下通道下电子均能通过整个器件, 但自旋向上的左电极一侧的传输路径与 Z7H-Z7H 器件一样受到抑制, 这说明自旋向上通道下电子的传输能力主要取决于左电极。最后总结得出, Z6H-Z6H 和 Z7H-Z6H 两个器件从局域态密度图上看均显示出其为电子提供了良好的传输通道, 增强了器件的电输运传输能力。

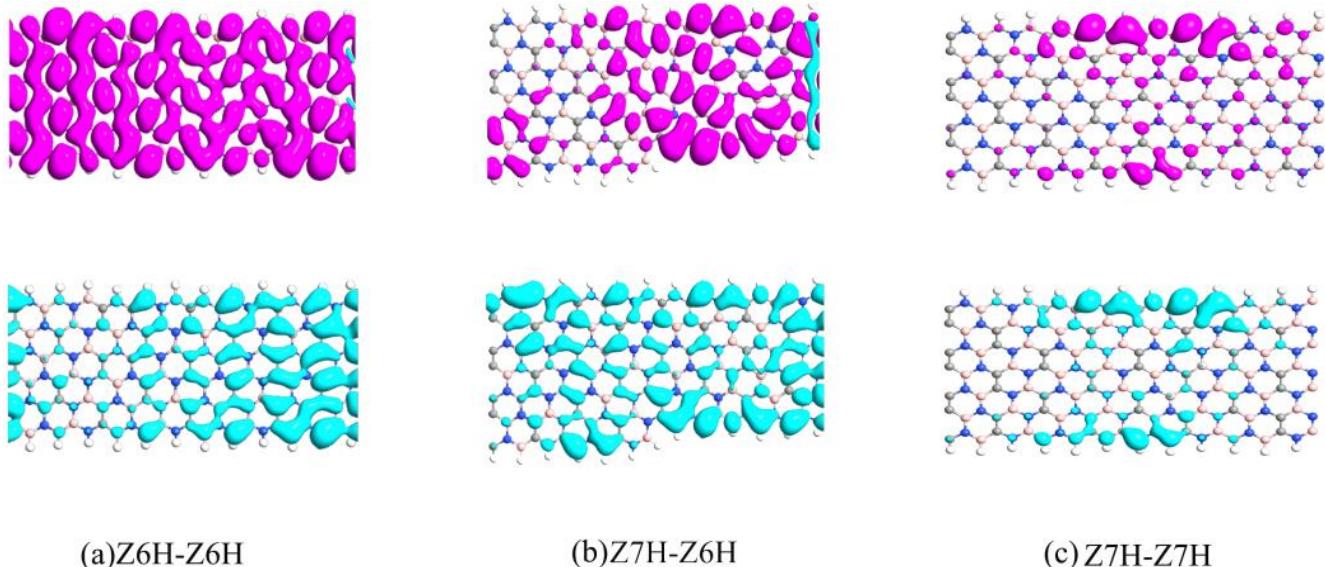


图 7 (a) Z6H-Z6H, (b) Z7H-Z6H, (c) Z7H-Z7H 的局域态密度图自旋向上 (上半部分) 和自旋向下 (下半部分) 的示意图

Figure 7 The local density map of (a) Z6H-Z6H, (b) Z7H-Z7H and (c) Z7H-Z6H (Spin up (top) and spin down (bottom))

## 4 结论

本文采用第一性原理的方法研究了二维 h-BCN2

单层的几何结构和电子特性以及一维 h-BCN 纳米带的电子输运特性。从能带图上看, 二维 h-BCN 单层表现出带隙值为 1.17 eV 的半导体性质。此外, 不同带宽的 A 型 h-BCN 纳米条带在 H 原子钝化前后, 均呈现出与

带隙值变化无关的半导体性质；而不同带宽的 Z 型 h-BCN 纳米条带在 H 原子钝化前后，随着条带宽度的增加，均呈现出带隙有规律性递增的半导体性质。然后，在构建的三种器件中，Z6H-Z6H 纳米器件的自旋向上和自旋向下的输运谱均在费米能级出现宽而强的透射峰，Z7H-Z6H 与 Z7H-Z7H 纳米器件的自旋向上与自旋向下的输运谱在费米能级处电子传输被遏制没有透射峰出现，Z7-Z7 纳米器件只在自旋向上时有较大的透射峰。Z6H-Z6H 与 Z7H-Z7H 纳米器件的 I-V 特性曲线表现出明显的 NDR 效应，在低偏置电压下有较高的电流值，而 Z7H-Z6H 与 Z7-Z7 纳米器件的 I-V 特性曲线与之相比是差异明显的非对称式变化规律。最后通过计算器件的态密度了解到 Z6H-Z6H、Z7H-Z7H 和 Z7H-Z6H 三种器件输运的内部机理。总而言之，本文有望促进 h-BCN 自旋纳米器件的进一步研究，为未来自旋纳米器件的发展提供了新的思路。

## 参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films [J]. *Science*, 2004, 306(5696): 666-669.
- [2] Grigorenko A N, Polini M, Novoselov K S. Graphene plasmonics [J]. *Nature photonics*, 2012, 6(11): 749-758.
- [3] 高瑞玲, 缪灵, 宋家琪, 等. 硼氮掺杂石墨烯电子特性的第一性原理研究 [C]. 2009 中国功能材料科技与产业高层论坛论文集, 2009.
- [4] Wang X, Pakdel A, Zhang J, et al. Large-surface-area BN nanosheets and their utilization in polymeric composites with improved thermal and dielectric properties [J]. *Nanoscale research letters*, 2012, 7(1): 1-7.
- [5] Kiran M, Raidongia K, Ramamurty U, et al. Improved mechanical properties of polymer nanocomposites incorporating graphene-like BN: Dependence on the number of BN layers [J]. *Scripta Materialia*, 2011, 64(6): 592-595.
- [6] Suryavanshi A P, Yu M F, Wen J, et al. Elastic modulus and resonance behavior of boron nitride nanotubes [J]. *Applied Physics Letters*, 2004, 84(14): 2527-2529.
- [7] Zhi C, Bando Y, Tang C, et al. Large - scale fabrication of boron nitride nanosheets and their utilization in polymeric composites with improved thermal and mechanical properties [J]. *Advanced materials*, 2009, 21(28): 2889-2893.
- [8] Novoselov K S, Jiang D, Schedin F, et al. Two-dimensional atomic crystals [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2005, 102(30): 10451-10453.
- [9] Beniwal S, Hooper J, Miller D P, et al. Graphene-like boron–carbon–nitrogen monolayers [J]. *ACS nano*, 2017, 11(3): 2486-2493.
- [10] Bi Y S, Liu B, Liu X Y, et al. A h-BCN for electrochemical sensor of dopamine and uric acid [J]. *Journal of Nanomaterials*, 2020: 1-9.
- [11] Garg H, Patial S, Raizada P, et al. Hexagonal-borocarbonitride (h-BCN) based heterostructure photocatalyst for energy and environmental applications: A review [J]. *Chemosphere*, 2022: 137610.
- [12] Kohn W, Sham L J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects [J]. *Physical review*, 1965, 140(4A): A1133.
- [13] Kresse G, Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals [J]. *Physical review B*, 1993, 47(1): 558.
- [14] José M S, Emilio A, Julian D G, et al. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002, 14: 2475.
- [15] Emilio A, Anglada E, Diéguez O, et al. The SIESTA method: developments and applicability [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2008, 20: 064208.
- [16] 王伟华, 卜祥天. 氧化石墨烯纳米带能带结构和态密度的第一性原理研究 [J]. *发光学报*, 2017, 38(12): 1617-1621.
- [17] 陈铜, 董先声, 严深浪. 低维新型纳米材料的电荷与自旋输运 (英文版) [M]. 长沙: 中南大学出版社, 2022.
- [18] 马瑞, 张华林. 掺杂菱形 BN 片的石墨烯纳米带的电子特性 [J]. *计算物理*, 2019(1): 7.
- [19] Kohn W, Becke A D, Parr R G. Density functional theory of electronic structure [J]. *The journal of physical chemistry*, 1996, 100(31): 12974-12980.
- [20] 陈铜, 许梁. 低维碳基纳米体系电子结构及输运机理研究 [M]. 长沙: 中南大学出版社, 2021.
- [21] 李燕, 董先声, 刘国港等. 基于二硒化铂 (PtSe<sub>2</sub>) 新型纳米器件高各向异性输运研究 [J/OL]. 有色金属科学与工程, 2023: 1-12.