

数据论文

Fe 掺杂对二维 CuI 电子结构及光学性质的影响*

张竺立† 张凡 王凯雷 李超 王锦涛

(长治学院物理系, 长治 046011)

(2024 年 9 月 22 日收到; 2024 年 11 月 14 日收到修改稿)

基于第一性原理计算方法研究不同浓度 Fe 掺杂对二维 CuI 半导体光电性质的影响. 研究表明, 本征二维 CuI 和 Fe 掺杂的二维 CuI 均为直接带隙半导体; 不同浓度 Fe 掺杂的二维 CuI 的总态密度和分波态密度图可知, 费米能级处能带数目增多是由于 Fe 元素掺杂后 Fe-d 和 Fe-p 轨道贡献所影响, 可以提高二维 CuI 的导电性. 随着 Fe 掺杂浓度的增大, ϵ_1 峰值逐渐减小, 且在能量相对较高的 3 eV 和 6 eV 附近的峰值向高能端移动, 浓度越大移动越明显; 这些均表明 Fe 掺杂可以增强二维 CuI 的耐高温性质; 当少量 Fe 掺杂时 ϵ_2 峰值增大, 表明材料吸收电磁波的能力增强, 可以激发更多导电电子, 且随着 Fe 掺杂浓度的增加, 吸收能力下降, 因此二维 CuI 的导电性受到抑制. 本征二维 CuI 和 Fe 掺杂后二维 CuI 的吸收系数表明该半导体在紫外区域均具有强的光子吸收能力. 掺杂 Fe 原子的二维 CuI 反射系数随掺杂元素金属性增加逐渐增大. 本文研究为二维半导体材料及二维 CuI 在光电子器件中的应用提供理论参考. 本文数据集可在 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00060> 中访问获取.

关键词: 二维 CuI, Fe 型掺杂, 第一性原理计算, 光电性质

PACS: 31.15.A-, 71.15.Dx, 71.15.Mb

DOI: 10.7498/aps.74.20241325

CSTR: 32037.14.aps.74.20241325

1 引言

2004 年, 曼彻斯特大学的安德烈·海姆和康斯坦丁·诺沃肖洛夫^[1]成功从石墨中剥离出单层石墨烯, 这一突破性发现引发了对二维材料研究的热潮. γ -CuI 是典型的 p 型半导体, 在光电子器件、太阳能电池和催化等领域具有广泛的应用^[2-6], 因此不论是在实验研究还是理论分析上均被大量报道^[7-16]. 由于 γ -CuI 的优异性能及二维材料的特殊物理结构, 人们逐渐对 γ -CuI 的二维结构产生了兴趣. 2018 年, Yao 等^[17]首次采用物理气相沉淀法制备出 γ -CuI 二维结构和范德瓦耳斯异质结, 并系统分析了其化学结构与导电性能. 然而, 纯相的二维 CuI 在某些方面的性能仍存在局限性, 例如导电性

较差、光响应范围有限等, 这些限制了其在高性能光电子器件中的应用^[18,19].

掺杂是一种有效的手段, 可以通过引入本征缺陷或外来元素来改变材料的电子能带结构, 进而调控其电学和光学性质^[20-22]. 实验上, Hao 等^[23]利用蒸发技术在乙腈溶剂中成功生长出了掺杂 Cl 的 γ -CuI 单晶, 光致发光和 X 射线激发发光光谱的结果表明晶体的近带边缘 (NBE) 发射明显增强, 同时其深能级 (DL) 发射被大大抑制. 晶体的 NBE 发射表现出亚纳秒的衰减时间使它具有优越的发光性能. 通过增加掺杂剂浓度, 可以预期 Cl 掺杂 γ -CuI 晶体的性能. 这项作为优化 γ -CuI 晶体的闪烁特性提供了建议. 紧接着他们针对实验结果做了理论研究, 提出了通过阳离子和阴离子掺杂来调谐固有缺陷以提高 γ -CuI 的闪烁性能, 采用第一性原

* 山西省科技重大专项计划“揭榜挂帅”项目 (批准号: 202201030201008) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhang2023@163.com

理计算方法研究了 Li, Na, Mg, F, Cl 和 Br 等掺杂剂的结构性质. 计算出 Li, Na 和 Mg 原子占据 Cu 位点. Cl 和 Br 原子取代了 I 原子. 重要的是, Cu 空位是由 Cl 和 Br 掺杂剂产生的, 而 I 空位是通过 Li, Na, Mg, Cl 和 Br 掺杂消除的^[24]. Krishnaiah 等^[25]研究了制备环境对 Sn(锡)掺杂 CuI 薄膜 (Sn-CuI) 非晶相的影响. 分析表明, 在手套箱中制备的 Sn-CuI 薄膜呈现出无定形相, 而在大气环境中加工的薄膜呈现出结晶相. 光电子能谱仪 (XPS) 和元素图谱分析验证了 CuI 和 Sn-CuI 薄膜的富铜化学成分, 并通过扫描电子显微镜 (SEM) 证明了薄膜的形貌和均匀性. 这些结果表明, 该材料可以成为柔性透明光电探测器的潜在材料. Taunk 等^[26]以简便的化学方法研究了掺杂 CuI 纳米晶体的结构和光学性质; 使用镉 (Cd) 和铁 (Fe) 作为掺杂剂, 产生了 CuI-Cd 和 CuI-Fe 样品, 分析证实了掺杂样品中存在 Cd 和 Fe; 使用 Tauc 图估计的光带隙能量为 4.1 eV (CuI), 4.0 eV (CuI-Cd) 和 4.0 eV (CuI-Fe). 宋娟与贺腾^[27]基于密度泛函理论计算了本征缺陷时二维 CuI 的光电特性, 分析了能带结构以及复介电函数. 王一等^[28,29]利用 OTFG 探究了本征二维 CuI、过渡金属 Fe, Co, Ni, Cu 掺杂二维 CuI 的光电性质, 但只探究了一种浓度的元素掺杂, 其研究结果单一.

目前国内外对于 Fe, Co 和 Ni 三种磁性元素掺杂的研究主要集中在纳米材料的磁学性能方面^[30-32], Fe 作为磁性最强的元素, 其对二维 CuI 的光学性质影响的研究较少, 因此为了提高二维半导体的发光性质, 有必要对 Fe 掺杂对二维 CuI 半导体的光学性质影响进行深入研究. Fe 元素掺杂使半导体变为半金属已经有了大量的实验研究和探讨^[33,34], 并且 Fe 元素掺杂在实验上对体 CuI 半导体的光电性能进行了调控^[27]. 基于单一浓度 Fe 元素掺杂对本征二维 CuI 的理论研究结果^[29], 我们将利用第一性原理计算系统研究不同浓度 Fe 掺杂对二维 CuI 电子结构与光学性质的影响. 通过对 Fe 掺杂二维 CuI 半导体的理论计算分析, 期望为高性能二维光电材料的设计与优化提供理论指导, 推动二维材料在光电领域的应用.

2 计算模型与方法

常温下的 CuI 存在的结构形式为闪锌矿结构

(γ -CuI), 空间群为 $F43m$, 其晶格常数为: $a = b = c = 0.605$ nm. 本文计算所采用二维 CuI 结构是将优化后的 γ -CuI 晶胞延 (111) 面切面, 然后分别向 a 和 b 基矢方向进行扩胞, 同时为避免结构周期性对计算结果的影响, 对垂直于二维表面的 c 方向加 1.0 nm 的真空层, 最终得到的本征二维 CuI 结构中分别有 8 个 Cu 原子和 8 个 I 原子, 如图 1 所示. 在本征二维 CuI 结构优化的基础上, 用 Fe 原子替换二维 CuI 结构中的 Cu 原子进行掺杂. 通过控制结构中的原子数来调控掺杂的浓度, 分别选用 $2 \times 2 \times 1$, $3 \times 3 \times 1$ 和 $4 \times 4 \times 1$ 的超胞, 如图 2 所示. 第一性原理计算均基于量子力学程序 CASTEP 软件完成, 使用 GGA (generalized-gradient-approximation)-PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 描述交换关联能, 二维 CuI 的 k 采样密度设置为 $4 \times 4 \times 1$, 截断能设置为 450 eV, 结构优化均利用 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) 算法, 并将优化的参数原子之间的相互作用力与自洽精度分

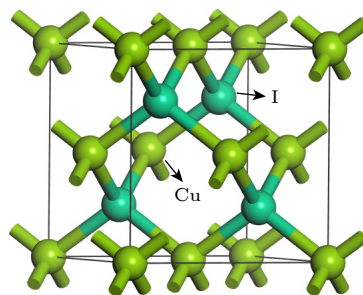


图 1 体 CuI 晶体结构示意图

Fig. 1. Schematic crystal structure of CuI.

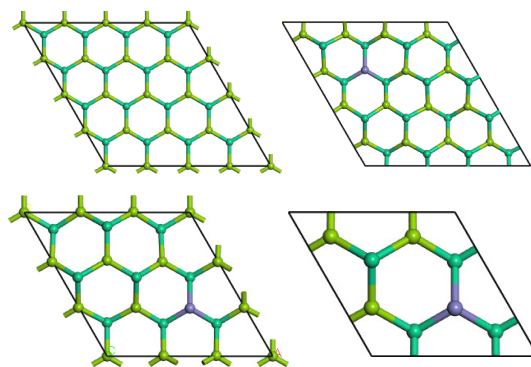


图 2 二维 CuI 及不同浓度 Fe 掺杂后的计算结构图 (a) 本征二维 CuI; (b) 6.25% Fe:CuI; (c) 12.5% Fe:CuI; (d) 25% Fe:CuI

Fig. 2. Calculation structure of two-dimensional CuI and Fe doping with different concentrations: (a) Intrinsic two-dimensional CuI; (b) 6.25% Fe:CuI; (c) 12.5% Fe:CuI; (d) 25% Fe:CuI.

别设置为 $0.01 \text{ eV}/\text{\AA}$ 与 $5.0 \times 10^{-7} \text{ eV}$, 作用在每个原子上的最小力与原子的最大位移分别设置为 0.02 GPa 与 $5.0 \times 10^{-5} \text{ \AA}$.

3 结果与分析

3.1 几何结构

本征二维 CuI 以及不同浓度 Fe 掺杂的二维 CuI 的键长以及键布居如表 1 所列. 从表 1 中可以看出, Fe 掺杂的二维 CuI 的 Cu—I 键长要略大于本征二维 CuI 的 Cu—I 键长, 这可能是由于替位掺杂 Fe 原子半径大于 Cu 原子半径导致掺杂后 Cu—I 键长缩短. 随着铁掺杂浓度的增大, Fe—I 键长逐渐减小, Cu—I 键长先增大后减小再增大, 在 12.5% Fe 掺杂浓度时 Cu—I 键长有减小趋势但相较本征二维 CuI 结构中的 Cu—I 键仍较长; 掺杂后 Fe—I 键长小于 Cu—I 键长, 这可能是由于亚铁离子的正电性较强, 导致 Fe—I 键长缩短造成对其他 Cu—I 键的拉伸. 键布居是衡量化学键的离子性和共价性特征的物理量, 键布居越大, 离子性越强. 掺杂后的二维 CuI 结构中 Cu—I 键的键布

居比本征二维 Cu—I 键布居小, 说明亚铁离子的掺杂导致 Cu—I 键的共价性减弱. 从掺杂后的 Fe—I 键布居明显大于 Cu—I 键布居可以得到 Fe—I 键的离子性增强, Cu—I 键的共价性减弱.

表 1 本征二维 CuI 及不同浓度 Fe 掺杂的二维 CuI 的键长与键布居

Table 1. Bond length and bond population of intrinsic two-dimensional CuI and Fe-doped two-dimensional CuI with different concentrations.

不同结构	键型	键长/ $\text{\AA}$	键布居
2D-CuI	Cu—I	2.541	1.25
25% Fe-2D-CuI	Cu—I	2.562	0.38
	Fe—I	2.496	0.50
12.5% Fe-2D-CuI	Cu—I	2.548	0.39
	Fe—I	2.498	0.44
6.25% Fe-2D-CuI	Cu—I	2.556	0.39
	Fe—I	2.535	0.44

3.2 电子结构

图 3 是本征二维 CuI 及不同 Fe 掺杂浓度的二维 CuI 结构的能带图. 从图 3 中可以看出, 能带图中的导带底和价带顶均位于布里渊区中心点, 跃迁方向仍为 G - G 跃迁, 这表明本征二维 CuI 和 Fe

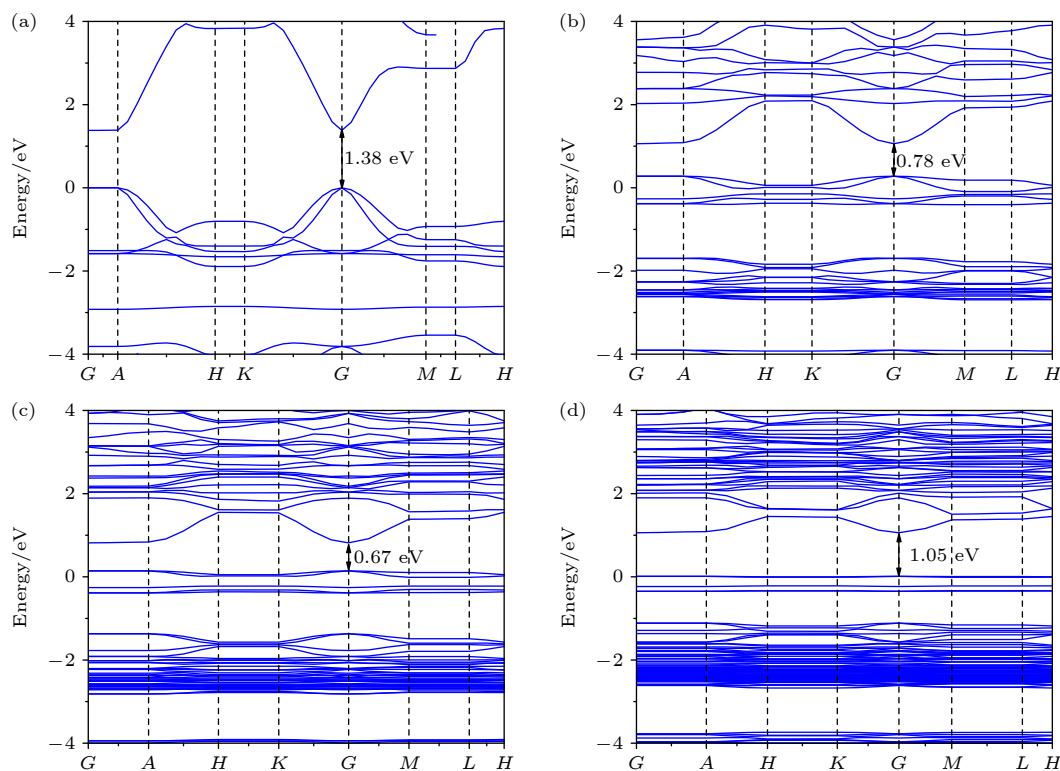


图 3 二维 CuI 及不同浓度 Fe 掺杂后的能带结构图 (a) 本征二维 CuI; (b) 25%Fe:CuI; (c) 12.5%Fe:CuI; (d) 6.25%Fe:CuI

Fig. 3. Band structure of 2D CuI and Fe doping with different concentrations: (a) Intrinsic two-dimensional CuI; (b) 25%Fe:CuI; (c) 12.5%Fe:CuI; (d) 6.25%Fe:CuI.

掺杂的二维 CuI 均为直接带隙半导体. 随着 Fe 元素的掺杂比例的增大, 费米面附近的态密度也随之增大. 图 3(b)、图 3(c) 和图 3(d) 可知, Fe:CuI 的费米能级进入价带区, 表明 Fe:CuI 成为 p 型半导体, 可用于半导体的光电器件制备领域中. 从不同 Fe 掺杂浓度的二维 CuI 的能带图可以看到价带能级起伏非常平滑, 导带起伏较大, 说明 Fe 掺杂使二维 CuI 导带底的电子有效质量减小, 而价带顶的空穴有效质量相对增大. 从图 3(b) 可以看出, 当 Fe 掺杂浓度达到 12.5% 以上时, 带隙值减小为原来的 50%. 由图 3(c) 和图 3(d) 可知, 当 Fe 掺杂浓度达到 25% 时的能带间隙较 Fe 掺杂浓度 12.5% 的二维 CuI 的能带间隙较大, 这可能是由于 Fe 掺杂浓度达到 25% 时, Fe 替位掺杂 Cu 浓度达到了 50%, 由于 Fe 相较于 Cu 不易失去电子, 在价带中更多的是提供受主能级, 从而导电性较差, 当 Fe 掺

杂浓度较高时能带带隙增大.

态密度为能带的投影, 它直接展示了半导体材料电子分布情况, 可以用来分析电子在各个原子轨道的分布与成键情况. 图 4 为本征二维 CuI 及不同浓度 Fe 掺杂的二维 CuI 结构的总态密度和分波态密度图. 本征二维 CuI 中的 Cu, I 的价电子态分别为 $3p^6 3d^{10} 4s^1$ 和 $5s^2 5p^5$, 从图 4(a) 本征二维 CuI 的总态密度和分波态密度图可知, 本征二维 CuI 的价带顶主要是 Cu-3d 和 I-5p 起主要作用, 导带底主要是 Cu-4s, Cu-3p 和 I-5s, I-5p 的成键态组合构成. 从图 4(b)–(d) 不同浓度 Fe 掺杂的二维 CuI 的总态密度和分波态密度图可知, 费米能级处能带数目增多是由于 Fe 元素掺杂后 Fe-d 和 Fe-p 轨道贡献所影响, 这会提高二维 CuI 的导电性. I 原子的 5p 和 Fe 原子的 3d 态有广泛的交叠, 主要是由于 I, Fe 原子间较强的 p-d 杂化作用

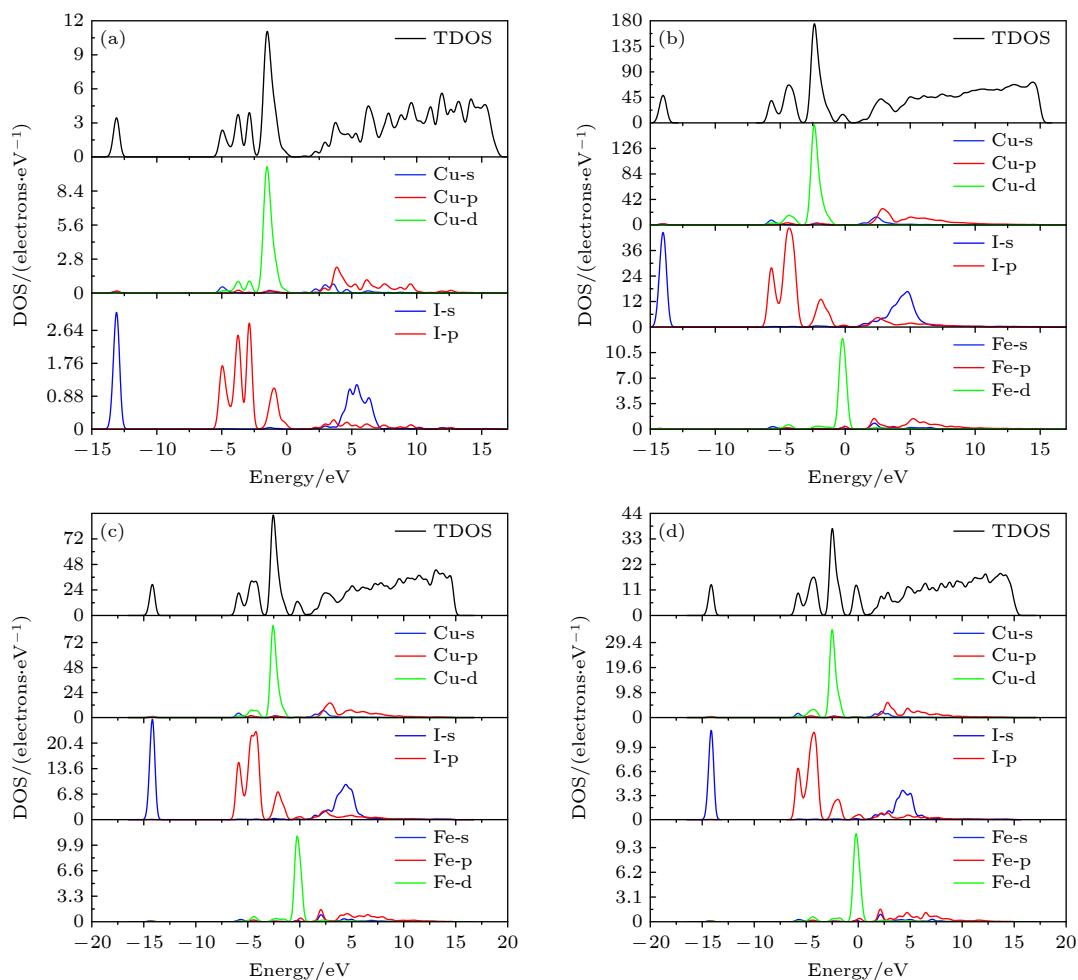


图 4 本征二维 CuI 及不同浓度 Fe 掺杂的二维 CuI 结构的总态密度和分波态密度图 (a) 本征二维 CuI; (b) 6.25% Fe:CuI; (c) 12.5% Fe:CuI; (d) 25%Fe:CuI

Fig. 4. Total state density and fractional state density of intrinsic two-dimensional CuI and two-dimensional CuI structures doped with different concentrations of Fe: (a) Intrinsic two-dimensional CuI; (b) 6.25% Fe:CuI; (c) 12.5% Fe:CuI; (d) 25%Fe:CuI.

造成的,从而导致带隙值变小.当含量达到 12.5% 以上时,能带带隙下降明显,从图 4(c) 和图 4(d) 中也可以看出,Fe 原子间的 p-d 杂化程度变强,这与能带图中的带隙大幅度减小相对应.

3.3 光学性质

介电函数分为实部和虚部,实部的变化曲线反映了材料光吸收性质的变化,虚部的变化曲线与介质材料的能量损失有关.图 5(a) 和图 5(b) 分别为本征二维 CuI 与不同浓度 Fe 掺杂后二维 CuI 的介电函数实部 ϵ_1 与虚部 ϵ_2 .由图 5(a) 可知本征二维 CuI 的 $\epsilon_1(0)$ 为 3.63,随着 Fe 掺杂浓度的增大,静介电函数 $\epsilon_1(0)$ 均增大,分别为 6.01, 5.58, 15.1, 其中 Fe 掺杂浓度为 25% 时静介电函数远大于其他两个浓度;12.5% Fe 掺杂浓度时二维 CuI 的 $\epsilon_1(0)$ 值比其他掺杂浓度的 $\epsilon_1(0)$ 值小,这个结果与掺杂后二维 CuI 的 Cu—I 键长变化规律和带隙变化规律相对应,由于 Fe 元素的掺杂浓度在 12.5% 时,Fe 原子间较强的 p-d 杂化作用导致材料对电场的响应减弱;随入射光子能量的增加, ϵ_1 急剧减小,在 7.5 eV 处达到最小值后随着能量的增加趋于不变并且与本征二维 CuI 的变化趋势一致;随着 Fe 掺杂浓度的增大, ϵ_1 峰值逐渐减小,且在能量相对较高的 3 和 6 eV 附近的峰值向高能端移动,浓度越大移动越明显;这些均表明 Fe 掺杂可以增强二维 CuI 的耐高温性质,当 Fe 掺杂浓度达到 25% 时可以极大地增强二维 CuI 的耐高温性质.图 5(b) 描绘了介电函数的虚数部分,随着 Fe 掺杂浓度的增大,掺杂后二维 CuI 的 $\epsilon_2(0)$ 分别为 1.16, 0.793, 3.82, 在 12.5% Fe 掺杂浓度时二维 CuI 的 $\epsilon_2(0)$ 值

比其他掺杂浓度的 $\epsilon_2(0)$ 值小,表明 Fe 元素的掺杂浓度在 12.5% 时,材料对电场的响应减弱,从而能量损耗变大.从虚部曲线可以看出,掺杂后在 0—0.5 eV 之间引入一个尖峰,虚部曲线中的峰位可以用电子结构来解释,结合态密度图分析可知,0—0.5 eV 处的尖峰主要来自于 I-p 态到 Fe-d 态电子的跃迁. Fe 掺杂后二维 CuI 的峰位在 4.91 eV 附近和 6.56 eV 附近,掺杂后在 4.91 eV 附近的峰位发生红移,这是由于随 Fe 掺杂浓度的增加,光学带隙逐渐减小,因此电子在跃迁时所需能量减少,进而带边上升向低能方向移动,出现红移现象.当 Fe 掺杂浓度为 6.25% 和 12.5% 时,在 6.56 eV 附近的峰位没有发生明显移动,但是随着 Fe 掺杂浓度的增加,光学带隙逐渐增大;当 Fe 掺杂浓度为 25% 时,结合态密度分析,由于导带处 Fe-p 态电子的贡献,价带电子在跃迁时受主能级减少导致所需能量增加,进而带边上升向高能方向移动,出现了蓝移现象.当少量 Fe 掺杂时主峰值增大,表明材料吸收电磁波的能力增强,可以激发更多导电电子;但随着 Fe 掺杂浓度的增加,吸收能力下降,因此导电性受到抑制.本征二维 CuI 与不同浓度 Fe 掺杂后二维 CuI 的介电函数变化趋势在能量相对较高的 10 eV 之后大致趋于一致.

吸收光谱是半导体材料在光学器件应用方面非常重要的影响因素之一.在可见光区域和紫外区域的光吸收强度对光学器件的设计应用有非常重要的影响.从图 6(a) 本征二维 CuI 和不同浓度 Fe 掺杂后二维 CuI 的吸收系数中可以看出,不论是本征二维 CuI 还是 Fe 掺杂后二维 CuI 在紫外区域均具有强的光子吸收能力. Fe 掺杂浓度为 25%

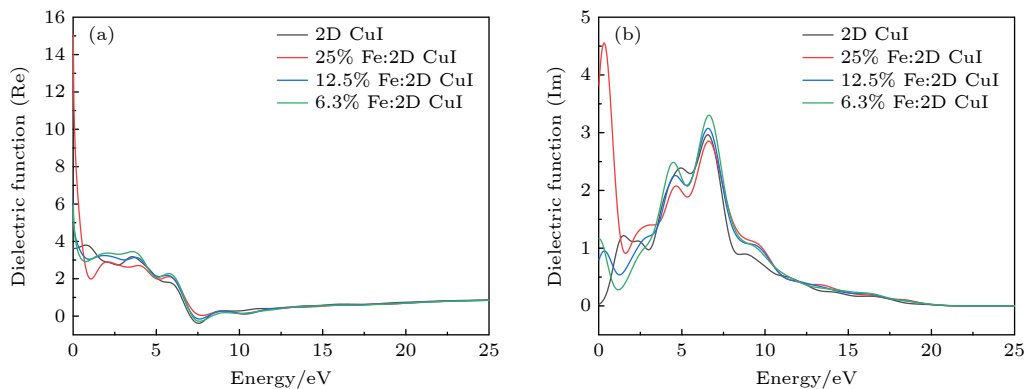


图 5 本征二维 CuI 与不同浓度 Fe 掺杂后二维 CuI 的介电函数 (a) 介电函数实部; (b) 介电函数虚部

Fig. 5. Dielectric function of intrinsic two-dimensional CuI doped with different concentrations of Fe: (a) Real part of the dielectric function; (b) imaginary part of the dielectric function.

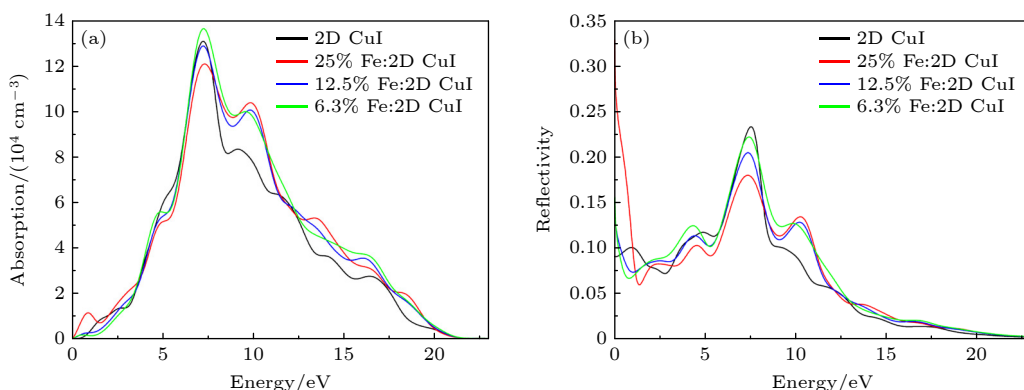


图6 本征二维CuI与不同浓度下Fe掺杂后二维CuI的吸收和反射系数 (a) 吸收系数; (b) 反射系数

Fig. 6. Absorption and reflection coefficients of intrinsic two-dimensional CuI doped with Fe at different concentrations: (a) Absorption coefficient; (b) reflection coefficient.

时二维CuI的吸收系数曲线在0.85 eV处引入一个小的吸收峰,由Fe掺杂的d轨道与Cu-d轨道之间电子跃迁引起,与分波态密度图结果相对应,这有利于拓宽二维CuI的光响应范围,为二维CuI在可见光区域的应用提供可能.本征二维CuI在7.21和9.12 eV处有两个较为明显的吸收峰,Fe原子掺入后7.21 eV处吸收峰只有大小变化较为明显,而9.12 eV处吸收峰出现了明显的蓝移且峰值都大于本征峰值,峰值随着Fe掺杂浓度的增加而增加.图6(b)是本征二维CuI和不同浓度Fe掺杂后二维CuI的反射系数,本征二维CuI静反射系数为0.0978.掺杂Fe原子的二维CuI静反射系数随掺杂元素金属性增加逐渐增大;在0 eV附近随能量的增加反射系数急剧减小,在1.3 eV左右达到极小值.在5 eV左右随掺杂元素金属性的增强反射系数峰值先增大后减小.在7.5 eV附近随掺杂元素金属性的增强反射系数峰值逐渐减小,并且向低能端移动.

4 总结

本研究通过第一性原理计算,探讨了不同浓度Fe掺杂对二维CuI光电性质的影响.计算结果表明,Fe掺杂可以显著改变二维CuI的物理性能.我们计算了纯二维CuI和不同浓度Fe掺杂的二维CuI的电子结构.结果显示,Fe掺杂后二维CuI的带隙明显减小,这有利于提高其光电转换效率.此外,Fe掺杂还引入了新的能级,这些能级可以作为电子跃迁的新通道,进一步提高光电性能.我们研究了Fe掺杂对二维CuI光吸收性能的影响.计

算结果表明,Fe掺杂后的二维CuI在紫外区域的吸收能力显著增强,同时还发现Fe掺杂可以引入新的吸收峰,这有助于拓宽二维CuI在可见光区域的光响应范围.综上所述,本研究不仅通过第一性原理计算表明,Fe掺杂可以有效地改善二维CuI的电子结构和光电性能,且通过对不同浓度掺杂结果分析,为二维CuI在光电领域的应用提供了理论支持.

数据可用性声明

支撑本研究成果的数据集可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00060> 中访问获取.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Liu A, Zhu H, Kim M G, Kim J, Noh Y Y 2021 *Adv. Sci.* **8** 2100546
- [3] Yang J L, Wang L J, Ruan S Y, Jiang X L, Yang C 2024 *J. Inorg. Mater.* **39** 1063 (in Chinese) [杨佳霖, 王亮君, 阮丝园, 蒋秀林, 杨长 2024 *无机材料学报* **39** 1063]
- [4] Su H T, Zhao Y X, Ding J, Dong K X, Yu W J, He Y 2017 *J. Univ. Sci. Technol. Chin.* **47** 621 (in Chinese) [苏和堂, 赵玉霞, 丁健, 董可秀, 于文娟, 何焯 2017 *中国科学技术大学学报* **47** 621]
- [5] Wu H J 2021 *M. S. Thesis* (Zhejiang: Ningbo University) (in Chinese) [吴海娟 2021 硕士学位论文 (浙江: 宁波大学)]
- [6] Zhang L, Liu X L, Hao S T, Gu M, Li Q L, Huang S M, Zhang J N 2019 *J. Synth. Cryst.* **48** 1405 (in Chinese) [张蕾, 刘小林, 郝书童, 顾牡, 李乾利, 黄世明, 张娟楠 2019 *人工晶体学报* **48** 1405]
- [7] Kumar S, Battabyal M, Sethupathi K, Satapathy D K 2022 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **39** 24228
- [8] Li Y W, Sun J F, Singh D J 2018 *Phys. Rev. Mater.* **2** 035003
- [9] Ali S M, Almohammed A, AlGarawi M S, AlGhamdi S S,

- Kassim H, Almutairi F N, Mahmood A, Saeed K 2023 *J. Mater. Sci. -Mater. Electron.* **34** 125
- [10] Yamada N, Ino R, Ninomiya Y 2016 *Chem. Mater.* **28** 4971
- [11] Tilemachou A, Zervos M, Othonos A, Pavloudis T, Kioseoglou J 2022 *Electron. Mater.* **3** 15
- [12] Ayhan M E, Shinde M, Todankar B, Desai P, Ranade A K, Tanemura M, Kalita G 2020 *Mater. Lett.* **262** 127074
- [13] Annadi A, Zhang N, Lim D B K, Gong H 2019 *ACS Appl. Electron. Mater.* **1** 1029
- [14] Wang M X, Wei H M, Wu Y Q, Yang C, Han P G, Juan F Y, Chen Y, Xu F, Cao B Q 2019 *Physica B* **573** 45
- [15] Chinnakutti K K, Pannierselvam V, Govindarajan D, Soman A K, Parasuraman K, Salammal S T 2019 *Prog. Nat. Sci. Mater. Int.* **29** 533
- [16] Li M, Zhang Z, Zhao Q, Huang M, Ouyang X 2023 *RSC Adv.* **13** 9615
- [17] Yao K K, Chen P, Zhang Z W, Li J, Ai R Q, Ma H F, Zhao B, Sun G Z, Wu R X, Tang X W, Hu J W, Duan X D 2018 *npj 2D Mater. Appl.* **2** 16
- [18] Xu J Y, Chen A L, Yu L F, Wei D H, Tian Q K, Wang H M, Qin Z Z, Qin G Z 2022 *Nanoscale* **14** 17401
- [19] Lee G, Lee Y J, Palotás K, Lee T, Soon A 2020 *J. Phys. Chem. C* **124** 16362
- [20] Huang L, Liu W L, Deng C S 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 136101 (in Chinese) [黄蕾, 刘文亮, 邓超生 2018 物理学报 **67** 136101]
- [21] Li J H, Hao Z R, Xue R X, Kan H M, Guan Y Q 2025 *J. At. Mol. Phys.* **42** 046002 (in Chinese) [李佳宏, 郝增瑞, 薛瑞鑫, 阚红梅, 关玉琴 2025 原子与分子物理学报 **42** 046002]
- [22] Ye J F, Qing M Z, Xiao Q Q, Wang A S, He A N, Xie Q 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 227301 (in Chinese) [叶建峰, 秦铭哲, 肖清泉, 王傲霜, 何安娜, 谢泉 2021 物理学报 **70** 227301]
- [23] Hao S, Liu X, Gu M, Li Q 2021 *The Tenth International Symposium on Ultrafast Phenomena and Terahertz Waves* Chengdu, China, September, 2021 p64
- [24] Hao S, Liu X, Gu M, Zhu J 2021 *Results Phys.* **26** 104461
- [25] Krishnaiah M, Kuma A, Mishra D, Kumar N, Song J, Jin S H 2023 *Mater. Lett.* **340** 134112
- [26] Taunk M, Kumar S, Aherwar A, Seo Y 2024 *J. Phys. Chem. Solids* **184** 111703
- [27] Song J, He T 2019 *J. At. Mol. Phys.* **39** 032003 (in Chinese) [宋娟, 贺腾 2019 原子与分子物理学报 **39** 032003]
- [28] Wang Y, Song J, Huang Z C, Jiang Y Q, Luo J Q, Guo X 2021 *Electron. Compon. Mater.* **40** 1202 (in Chinese) [王一, 宋娟, 黄泽琛, 江玉琪, 罗珺茜, 郭祥 2021 电子元件与材料 **40** 1202]
- [29] Wang Y, Yao D L, Song J, Wang J H, Luo Z J, Ding Z, Guo X 2022 *Funct. Mater.* **53** 1112 (in Chinese) [王一, 姚登浪, 宋娟, 王继红, 罗子江, 丁召, 郭祥 2022 功能材料 **53** 1112]
- [30] Li B, Xing T, Zhong M Z, Huang L, Lei N, Zhang J, Li J B, Wei Z M 2017 *Nat. Commun.* **8** 1958
- [31] Mishra N, Pandey B P, Kumar S 2022 *IEEE Trans. Electron Devices* **69** 1553
- [32] Wang S X, Zhao X C, Pan D Q, Pang G W, Liu C X, Shi L Q, Liu G A, Lei B C, Huang Y N, Zhang L L 2020 *Acta Phys. Sin.* **19** 197101 (in Chinese) [王少霞, 赵旭才, 潘多桥, 庞国旺, 刘晨曦, 史蕾倩, 刘桂安, 雷博程, 黄以能, 张丽丽 2020 物理学报 **19** 197101]
- [33] Zhou Y G, Xiao-Dong J, Wang Z G, Xiao H Y, Gao F, Zu X T 2010 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** 7588
- [34] Sevinçli H, Topsakal M, Durgun E, Ciraci S 2008 *Phys. Rev. B* **77** 3107

DATA PAPERS

Effect of Fe doping on electronic structure and optical properties of two-dimensional CuI^{*}ZHANG Zhuli[†] ZHANG Fan WANG Kailei LI Chao WANG Jintao

(Changzhi University, Changzhi 046011, China)

(Received 22 September 2024; revised manuscript received 14 November 2024)

Abstract

The effects of different concentrations of Fe doping on the photoelectric properties of two-dimensional (2D) CuI semiconductor are studied based on the first-principles calculation method. The results show that both intrinsic 2D CuI and Fe-doped 2D CuI are direct band gap semiconductors. The total state density and partial wave state density of 2D CuI doped with different concentrations of Fe show that the increase in the number of energy bands at Fermi level is due to the influence of Fe-d and Fe-p orbital contributions after Fe doping, which can improve the conductivity of 2D CuI. With the increase of Fe doping concentration, the peak value of ε_1 decreases gradually, and the peak value moves toward the high-energy end near the relatively high energy 3 eV and 6 eV, and the greater the concentration, the more obvious the shift is. These results indicate that Fe doping can enhance the high temperature resistance of 2D CuI. When a small amount of Fe is doped, the ε_2 peak value increases, indicating that the ability of material to absorb electromagnetic waves is enhanced, which can stimulate more conductive electrons, and with the increase of Fe doping concentration, the absorption capability decreases, so the conductivity of 2D CuI is inhibited. The absorption coefficient of intrinsic 2D CuI and Fe-doped 2D CuI indicate that the semiconductor has strong ability to absorb photons in the ultraviolet region. The 2D CuI reflection coefficient of doped Fe atoms increases gradually with the increase of metallic properties of doped elements. This study provides theoretical reference for applying the 2D semiconductor materials and 2D CuI to optoelectronic devices. All the data presented in this paper are openly available at <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00060>.

Keywords: two-dimensional CuI, Fe doping, first principles calculation, photoelectric property**PACS:** 31.15.A–, 71.15.Dx, 71.15.Mb**DOI:** [10.7498/aps.74.20241325](https://doi.org/10.7498/aps.74.20241325)**CSTR:** [32037.14.aps.74.20241325](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20241325)

* Project supported by the Major Science and Technology Special Program “Unveiling the List and Leading the Way” Project of Shanxi Province, China (Grant No. 202201030201008).

† Corresponding author. E-mail: zlzhang2023@163.com

Fe掺杂对二维CuI电子结构及光学性质的影响

张竺立 张凡 王凯雷 李超 王锦涛

Effect of Fe doping on electronic structure and optical properties of two-dimensional CuI

ZHANG Zhuli ZHANG Fan WANG Kailei LI Chao WANG Jintao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 023102 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20241325

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241325>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

V掺杂二维MoS₂体系气体吸附性能的第一性原理研究

First-principles investigations on gas adsorption properties of V-doped monolayer MoS₂

物理学报. 2021, 70(8): 080701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202043>

原子尺度构建二维材料的第一性原理计算研究

First principles calculation of two-dimensional materials at an atomic scale

物理学报. 2021, 70(2): 027301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201636>

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

First-principles study of electronic structure, magnetic and optical properties of Ti, V, Co and Ni doped two-dimensional CrSi₂ materials

物理学报. 2021, 70(22): 227301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211023>

二维材料XTe₂ (X = Pd, Pt)热电性能的第一性原理计算

Thermoelectric transport properties of two-dimensional materials XTe₂ (X = Pd, Pt) via first-principles calculations

物理学报. 2021, 70(11): 116301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201939>

原子替位掺杂对单层Janus WSeTe电子结构的影响

Effects of atomic substitutional doping on electronic structure of monolayer Janus WSeTe

物理学报. 2021, 70(9): 096301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201888>

Fe₃GeTe₂/h-BN/石墨烯二维异质结器件中的高效率自旋注入

Efficient spin injection in Fe₃GeTe₂/h-BN/graphene heterostructure

物理学报. 2021, 70(12): 129101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202136>