

Ru、Hf原子掺杂硅烯吸附气体分子的第一性原理研究

渠子轩¹, 石家乐¹, 许 巍², 任青颖², 李金泽¹, 李 卫^{1,2*}

(1. 南京邮电大学集成电路科学与工程学院(产教融合学院), 江苏南京 210023;
2. 南京邮电大学电子与光学工程学院、柔性电子(未来技术)学院, 江苏南京 210023)

摘要: 本文基于第一性原理计算, 系统研究了本征硅烯以及过渡金属元素钌(Ruthenium, Ru)和铪(Hafnium, Hf)掺杂后硅烯的几何结构与电子性质。计算结果表明, 在两种掺杂体系中, Ru掺杂后的硅烯具有更高的结构稳定性, Hf掺杂后的硅烯则表现出了优异的气体吸附性能。在确定气体分子的最佳吸附点位后, 本文重点对比研究了一氧化碳(CO)、二氧化碳(CO₂)、硫化氢(H₂S)、氨气(NH₃)、二氧化硫(SO₂)、甲醛(H₂CO)六种气体分子分别在本征硅烯、Ru掺杂硅烯和Hf掺杂硅烯三种体系表面的吸附性能, 通过对比分析吸附距离、吸附能、转移电荷、恢复时间、态密度的变化, 分析吸附机理与掺杂对吸附能力和气敏性能的影响。理论研究发现, 除NH₃外, 其余所选气体分子与本征硅烯均未表现出明显相互作用, 说明本征硅烯对所选气体的检测灵敏度有限。然而, 在Ru和Hf掺杂的体系中, 所选气体分子均呈现出了显著的吸附作用。相较于本征体系, 掺杂体系在吸附气体分子后表现出较强的结合强度和更明显的电荷转移。此外, 部分气体分子在掺杂体系表面具有适中的吸附能与可接受的恢复时间, 表明材料具备良好的可逆吸附潜力。综上所述, 本研究表明Ru、Hf原子掺杂能够有效调控硅烯的电子性质, 显著增强其对CO、CO₂、H₂S、NH₃、SO₂、H₂CO气体的吸附能力与气敏性能, 并为其在气体吸附及其他相关应用领域的潜在应用提供了理论支持, 对于开发新型高效吸附材料以解决环境和能源领域的问题具有重要意义。

关键词: 硅烯; 第一性原理; 掺杂; 气体传感器; 气敏性能; 二维材料

基金项目: 江苏省高等学校自然科学研究重大项目(No.20KJA510001); 江苏省“六大人才”高峰计划; 江苏省高校青蓝工程中青年学术带头人计划

中图分类号: TN29; O472+.4

文献标识码: A

文章编号: 0372-2112(2026)01-0234-14

电子学报URL: <http://www.ejournal.org.cn>

DOI: 10.12263/DZXB.20250781

First Principles Study on the Adsorption of Gas Molecule on Ru and Hf Doped Silicene

QU Zixuan¹, SHI Jiale¹, XU Wei², REN Qingying², LI Jinze¹, LI Wei^{1,2*}

(1. College of Integrated Circuit Science and Engineering (College of Industry-Education Integration), Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing, Jiangsu 210023, China;

2. College of Electronic and Optical Engineering & College of Flexible Electronics (Future Technology), Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing, Jiangsu 210023, China)

Abstract: Based on first-principles calculations, this work systematically investigates the geometric structures and electronic properties of pristine silicene as well as ruthenium (Ru)-doped and hafnium (Hf)-doped silicene. The calculated results indicate that among the two doped systems, Ru-doped silicene exhibits higher structural stability, whereas Hf-doped silicene demonstrates superior gas adsorption performance. After determining the most favorable adsorption sites for gas molecules, a comprehensive comparative study is carried out on the adsorption behaviors of six gas molecules—CO, CO₂, H₂S, NH₃, SO₂, and H₂CO—on the surfaces of pristine silicene, Ru-doped silicene, and Hf-doped silicene. The adsorption mechanisms and the effects of doping on adsorption capacity and gas-sensing performance are analyzed by comparing the adsorption distance, adsorption energy, charge transfer, recovery time, and density of states. Theoretical results reveal that, except for NH₃, the selected gas molecules exhibit negligible interactions with pristine silicene, indicating its limited sensitivity toward these gases. In contrast, significant adsorption interactions are observed for all selected gas molecules in the Ru-doped and Hf-doped systems. Compared with the pristine system, the doped silicene exhibits stronger binding strength and more pronounced charge transfer after gas adsorption. Moreover, some gas molecules show moderate adsorption energies

and acceptable recovery times on the doped surfaces, suggesting good potential for reversible adsorption. In summary, this study demonstrates that Ru and Hf atom doping can effectively modulate the electronic properties of silicene and significantly enhance its adsorption capability and gas-sensing performance toward CO, CO₂, H₂S, NH₃, SO₂, and H₂CO, providing theoretical support for its potential applications in gas adsorption and other related fields, and offering valuable insights for the development of novel high-performance adsorption materials to address environmental and energy-related challenges.

Keywords: silicene; first-principles; doping; gas sensor; gas sensing property; two-dimensional materials

Foundation Item(s): Major Project of Natural Science Research in Universities of Jiangsu Province (No.20KJA50001); "Six Talents" High-Level Talent Program of Jiangsu Province; the Young and Middle-Aged Academic Leader Program of Jiangsu University Blue Project

0 引言

近年来,工业发展、科技进步以及城市化进程极大地改善了人类生活水平,但也带来了严重的环境污染问题。其中,空气污染尤为突出,各种有害气体对人体健康产生直接或间接影响。例如,高浓度的一氧化碳(CO)可导致头晕、呕吐、意识丧失,甚至危及生命;二氧化硫(SO₂)是酸性气体,可导致酸雨形成;长期或重复暴露于低浓度的硫化氢(H₂S)、氨气(NH₃)和甲醛(H₂CO)环境中可能对呼吸系统、肺功能及中枢神经系统造成慢性损害。这些气体通常浓度极低(ppm 级别),因此开发高灵敏度、选择性强、低功耗的气体传感器对环境监测与人体健康保障具有重要意义。

金属氧化物半导体(Metal Oxide Semiconductor, MOS)因其响应速度快、制备成本低、操作简便而成为研究热点,近年来研究者尝试通过材料组成和结构设计实现性能提升。例如, PEDOT:PSS@WO₃核壳异质结构在室温下对三乙胺检测显示出优异性^[1]; WO₃-MoO₃ n-n 异质结构在低温下对三乙胺表现出高灵敏响应^[2]; ZnO@ZIF-8 核壳结构可显著提高甲醛气体检测选择性^[3]。这些研究表明,通过材料成分、界面或异质结构的调控可以有效改善气体吸附和传感行为。但多数 MOS 材料存在选择性差、响应时间长、湿度敏感等缺点,限制了其应用^[4]。

自从 2004 年英国 Manchester 大学的 Novoselov 等人^[5]通过胶带反复剥离石墨的方法首次获得独立的石墨烯以来,石墨烯以其优异的电子学性能在传感材料领域备受关注。研究人员通过化学原子掺杂^[6-11]或者引入物理缺陷^[12]的方法,改善石墨烯的性质,提高其气敏性能,然而石墨烯的带隙大小却难以调控^[13-14],因此不适合用作气体传感器的检测材料。

硅元素和碳元素在化学周期表上同属于第四族元素,它们具有相似的价电子结构^[15]。由于硅原子具有较大的原子半径与较低的负电性,因此,硅烯和石墨烯相比具有许多不同的性质。在结构与性能上,硅烯与石墨烯表现出明显差异。硅烯以屈曲薄片的

形式稳定存在,其六边形尺寸更大,两个亚晶格不在同一平面内,且硅烯表现出自旋-轨道耦合效应,产生自旋分裂的能带结构,使得体系具有微小的带隙。和石墨烯中 sp²杂化不同,硅烯呈现出部分 sp³轨道杂化特征,使得硅烯呈现出蜂窝状结构^[16]。另外,硅烯中的 π 键很容易被外来原子的吸附破坏,所以硅烯与吸附物的结合相对强烈^[17]。硅烯这些独特的效应使得其在吸附气体分子时会对气体分子进行有效地筛分,从而表现出不同的气敏性能^[18]。近年来,研究人员通过许多方法调控硅烯的电子结构,以增强其气敏性能^[19]。Nguyen 等人^[20]研究发现 Al 掺杂的硅烯是 NO 与 CO 气体的良好传感器; Tang 等人^[21]发现 Fe、Ti 的掺杂增强了本征硅烯的气敏性能。也有一些研究人员通过其他手段调控硅烯的电子性质, Xiao 等人^[22]通过引入缺陷的方法调节硅烯的电子结构,结果表明,引入缺陷后的硅烯可以作为小分子气体的吸附材料。

通过阅读大量文献发现, Ru 原子与 Hf 原子掺杂硅烯进行气体吸附的相关文献较少,因此本文选取 Ru、Hf 原子作为掺杂元素修饰本征硅烯^[23],采用第一性原理计算研究两种掺杂体系与气体分子间作用关系。研究发现,掺杂 Ru 原子对硅烯的结构影响十分小, Ru-Si 键长为 2.266 Å,与硅烯键长 2.276 Å 几乎相等,掺杂后的体系表现为金属性; Hf 原子掺杂后的硅烯,在费米能级处打开 0.187 eV 的直接带隙,表现出半导体性。为了对比两种金属元素掺杂后对本征硅烯气敏性能的影响,本文选取了 CO、CO₂、H₂S、NH₃、SO₂、H₂CO 这六种气体分子,研究它们与本征硅烯、Ru 掺杂硅烯和 Hf 掺杂硅烯间的吸附作用。

1 计算方法与结构模型

本文中所有计算均采用密度泛函理论构架下的基于第一性原理的计算方法,使用 Materials Studio 软件中的 CASTEP 程序包^[24],采用广义梯度近似(Generalized Gradient Approximation, GGA)的 PBE(Perdew-Burke-Emzerhof)泛函作为电子和电子相互作用的交换关联函数^[25]。在计算过程中,首先选定两个原子

的硅烯单晶胞为模型,采用BFGS算法对其进行结构优化;随后选取 $3 \times 3 \times 1$ 的硅烯超胞作为模型,为防止层间相互作用,在 z 轴方向选取了 20 \AA 的真空层。平面波基组的动能截断能设置为 480 eV ,使用 $5 \times 5 \times 1$ 网格在布里渊区内取样。为确保结构完整,能量收敛精度设为 $1 \times 10^{-5} \text{ eV/atom}$,自洽场(Self-Consistent-Field, SCF)计算收敛阈值为 $1 \times 10^{-6} \text{ eV/atom}$ 。此外,在计算中引入了TS方法来修正范德瓦耳斯(Van der Waals, VdW)相互作用力,以获得较为可靠的库仑作用和吸附能。

2 结果与讨论

2.1 Ru、Hf原子掺杂硅烯结构

本文构建的掺杂前后的硅烯几何优化构型如图1所示。本征硅烯优化后键长为 2.28 \AA ,翘曲高度为 0.44 \AA ,晶格参数为 3.86 \AA ,硅烯在K点打开了约 0.08 eV 的带隙,整体呈现出半金属性质,这些性质与文献[26-32]基本一致。

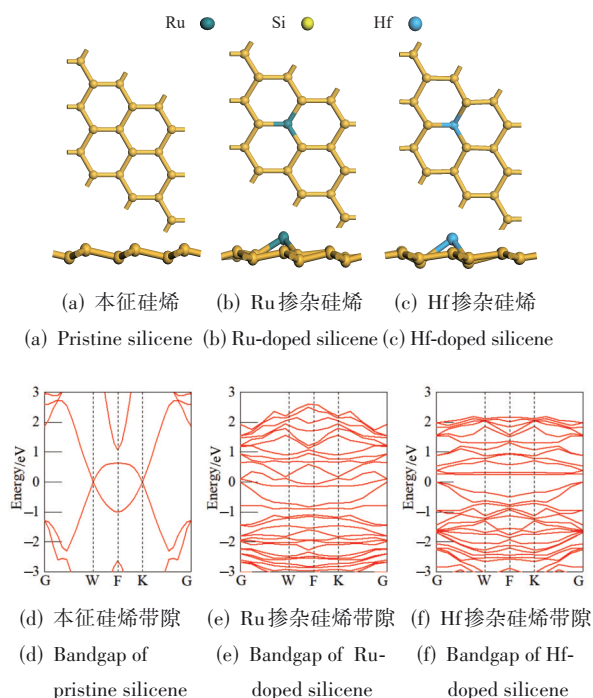


图1 三种基底材料的结构图与带隙图

Figure 1 Structure diagrams and bandgap diagrams of the three substrate materials

为了研究Ru原子与Hf原子掺杂硅烯结构的稳定性,定义形成能 E_f 如式(1)所示:

$$E_f = E_{\text{Si} + \text{Ru/Hf}} - E_{\text{Si}} - E_{\text{atom}} \quad (1)$$

其中, $E_{\text{Si} + \text{Ru/Hf}}$ 代表金属元素Ru、Hf掺杂硅烯结构的总能量; E_{Si} 为本征硅烯的能量; E_{atom} 为掺杂原子的能量。

E_f 小于0说明结构稳定,且值越小稳定性越强。

通过计算,掺杂Ru和掺杂Hf的硅烯的形成能均为负值,分别为 -2.2913 eV 和 -0.1358 eV ,这表明这两种体系均是自发反应,整个系统是稳定的。Ru原子掺杂的硅烯中,Ru-Si键长为 2.266 \AA ,大小和本征硅烯的键长几乎一致,整个系统的能带结构变得更加密集,导带与价带重叠,体系呈现金属性。在Hf掺杂的硅烯中,Hf-Si键长为 2.569 \AA ,略大于本征硅烯的键长,从图1(f)可见,Hf掺杂硅烯体系的能带结构变得更加密集,并且在费米能级处形成了 0.187 eV 的带隙,表现出半导体性质。

通过观察两种掺杂体系的剖面图可以发现,相比于本征硅烯,两种掺杂体系的比表面积均明显增大,为吸附气体分子提供了更多的活性点位。

2.2 气体分子吸附特性

2.2.1 吸附结构与吸附能分析

为了确定气体分子在Ru+Si和Hf+Si上的最佳吸附位置,对于Ru/Hf+Si本文考虑了五种不同的吸附点位,包括Ru/Hf顶位(取代Ru/Hf原子的上方)、Si顶位(硅原子上方)、Si环空位(硅环中心)、Si桥位(Si-Si键中心)及Ru/Hf桥位(Ru/Hf-Si键中心)。每种气体分子初始吸附距离均为 3 \AA ,误差小于 0.01 \AA ,使用BFGS算法对结构进行优化。

通过对比吸附能与吸附距离,可以判断掺杂的金属原子对本征硅烯气敏特性的影响,气体分子在硅烯表面的吸附能 E_{ad} 定义为

$$E_{\text{ad}} = E_{\text{Si} + \text{gas}} - E_{\text{Si}} - E_{\text{gas}} \quad (2)$$

其中, $E_{\text{Si} + \text{gas}}$ 为整个吸附体系的总能量; E_{gas} 为单个气体分子的能量; E_{Si} 为硅烯体系能量。当 $E_{\text{ad}} < 0$ 时,整个吸附体系属于放热状态,说明硅烯吸附气体的反应可以自发进行。由此得出结论, E_{ad} 负值越高,吸附作用越强^[13],气体与材料间的相互作用越强烈。吸附能的大小要适中,吸附能的 E_{ad} 负值过高可能导致气体分子吸附后脱附时间过长,气体传感器无法重复使用。

图2展示了本征硅烯、Ru掺杂硅烯、Hf掺杂硅烯三种体系上所选气体分子的最佳吸附点位。掺杂Ru或Hf改变了硅烯表面局部电子密度分布,形成富电子或空穴区,使气体分子能够在电子供体或受体区域稳定吸附。其中, H_2CO 分子由于其C=O的 π 轨道能够与两个金属原子同时相互作用,因此桥位成为最佳吸附位置;而其他气体分子则倾向于在掺杂金属原子顶位吸附,以实现单点电子相互作用,达到最低吸附能^[33]。

本征硅烯吸附气体化后的结构如图3所示,本征硅烯仅与 NH_3 气体分子具有一定的相互作用, NH_3 吸附后与本征硅烯形成了化学键,其Si-N键长为 2.019 \AA ,其余气体分子CO、 CO_2 、 H_2S 、 SO_2 与本征硅烯的吸附距

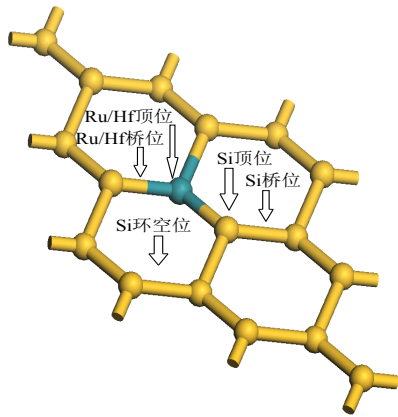


图2 五种气体吸附点位
Figure 2 Five adsorption sites of the gas

离均大于 3 Å, 说明这些气体与本征硅烯缺乏有力的相互作用, 本征硅烯对这些气体敏感度不高。在 Ru 原子掺杂的硅烯中, CO、CO₂ 呈现出了物理吸附的性质, 吸附距离分别为 2.270~2.296 Å; 其余气体分子均表现出化学吸附的特征, 与基底材料形成稳定化学键, 化学键长在 2.02~2.361 Å 之间, 可见在 Ru 掺杂后, 六种气体分子与基底材料的吸附距离明显缩短。在 Hf 掺杂的硅烯中, 所有气体均与基底材料形成稳定的化学键, 其中 CO 气体分子的吸附能较小, 吸附类型同时具有物理吸附与化学吸附的性质, 其余气体分子与基底材料形成的化学键长在 1.961~2.751 Å 之间。

图 4 更加详细地说明了三种体系在吸附气体分子后的吸附能与吸附距离。从图 4 结果可知, Ru、Hf

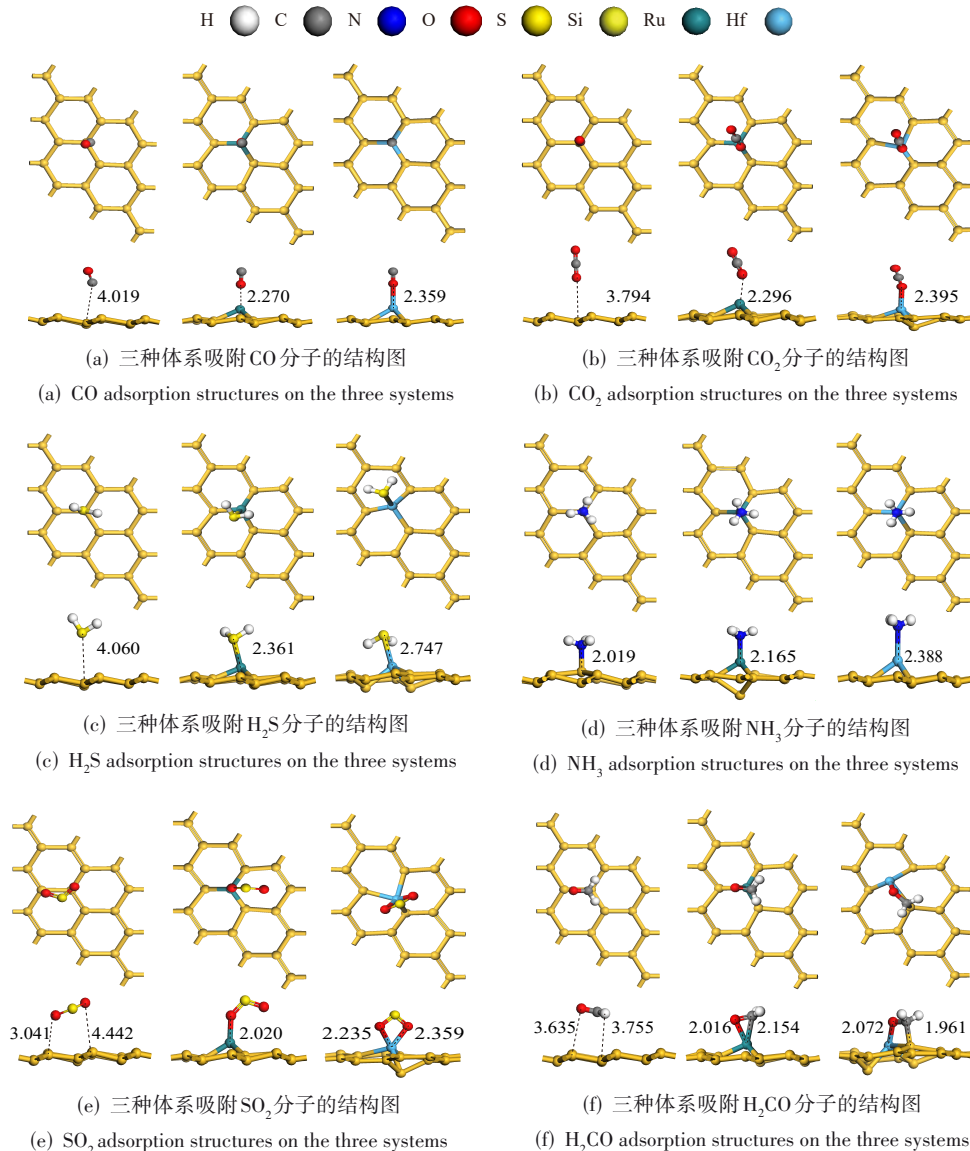


图3 不同气体分子在本征硅烯、Ru 掺杂硅烯和 Hf 掺杂硅烯上的吸附图
Figure 3 Adsorption structure of different gas molecules on pristine silicene, Ru-doped silicene, and Hf-doped silicene

原子的掺杂可以改善硅烯的气敏性能,使得原本与本征硅烯无明显吸附作用的CO、CO₂、H₂S、SO₂、H₂CO气体分子与基底材料产生较强的相互作用力。对于在本征硅烯上具有较为明显吸附作用的NH₃气体分子,虽然Ru原子和Hf原子掺杂后的硅烯略微加大了基底材料与NH₃气体分子的吸附距离,但是吸附能的绝对值也变得更大,说明在Ru原子和Hf原子掺杂后的硅烯吸附NH₃气体分子更趋向于自发性进行,使得吸附NH₃气体分子后的体系更加稳定^[34]。

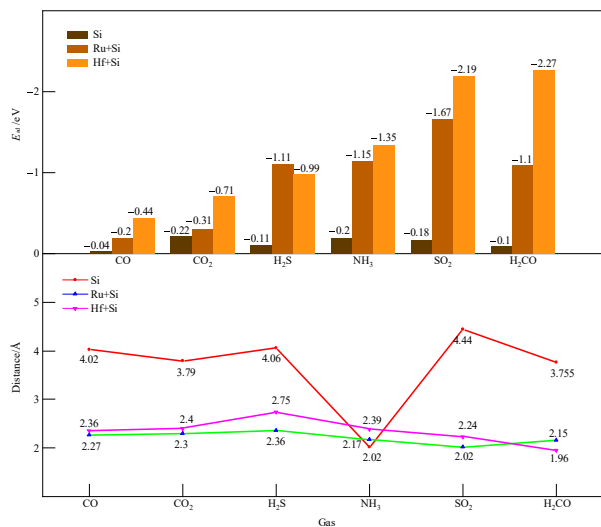


图4 不同气体分子在本征硅烯、Ru掺杂、Hf掺杂硅烯上的吸附能与吸附距离对比

Figure 4 Adsorption energies and distances of different gas molecules on pristine, Ru-doped, and Hf-doped silicene

综上所述,Ru与Hf掺杂使硅烯对CO、CO₂、H₂S、NH₃、SO₂与H₂CO的吸附能的绝对值均有所提高,除NH₃外各气体的吸附距离明显减小,表明掺杂增强了气体分子与表面的相互作用与电子耦合,形成了更稳固的吸附状态,提高了本征硅烯对这些气体分子的敏感性。这种更稳固的吸附状态通常会伴随着更大的电荷转移,具体电荷转移分析见2.2.4节。

2.2.2 能带结构分析

禁带宽度体现了材料的导电能力,吸附不同气体分子而呈现不同带隙的基底材料可以加强气体传感器对气体分子的筛分性能^[35]。通常来讲,电阻率 σ 与带隙的关系如式(3)所示:

$$\sigma = CT^3 e^{-\frac{E_g}{K_B T}} \quad (3)$$

其中, C 是与材料有关的常数; T 是温度; K_B 是玻尔兹曼常数; E_g 是禁带宽度。基底材料吸附气体后,气体与材料之间会发生电荷转移,使得基底材料的电阻率发生变化,由此可以通过电阻率的变化分析吸附气体的类型。

为了解Ru原子与Hf原子掺杂后的硅烯对气体分子的吸附性能,本文分析了两种掺杂体系下吸附不同气体分子的能带结构,分析它们导电性能的变化。

如图5所示,在吸附气体分子后,两种不同的掺杂体系的禁带宽度的变化有所不同。表1给出了六种气体分子分别吸附于本征硅烯、Ru掺杂硅烯和Hf掺杂硅烯后基底材料的禁带宽度。本征硅烯在气体吸附后带隙变化较小,仍保持准金属性特征,说明其电子结构受气体吸附影响有限。然而,Ru与Hf掺杂后,带隙均发生明显变化:Ru掺杂体系的带隙普遍接近0 eV,呈现出金属性,表明Ru掺杂体系在气体吸附过程中具有良好的电导连续性和电子快速响应能力,适合用作高灵敏气体检测;而Hf掺杂体系的带隙范围较宽,表现出显著的半导体化特征。从带隙的角度分析,Hf掺杂的硅烯在吸附不同气体分子后呈现出了不同的禁带宽度,这种特性使掺杂Hf的硅烯在检测气体时可以通过基底材料导电性的变化来判断吸附的气体类型,表明Hf掺杂硅烯对这几种气体分子表现出良好的选择性,是一种很有前途的气体传感器材料^[36]。

表1 气体分子吸附在本征硅烯、Ru/Hf掺杂的硅烯上时体系的禁带宽度(E_g) 单位:eV

Table 1 Band gap (E_g) of gas-adsorbed systems: pristine, Ru-doped, and Hf-doped silicene unit: eV

Gas	E_{gSi}	E_{gRu}	E_{gHf}
CO	0.013	0	0.238
CO ₂	0.001	0	0.298
H ₂ S	0.019	0	0.165
NH ₃	0.005	0	0.194
SO ₂	0.067	0	0.149
H ₂ CO	0.010	0	0.080

注: E_{gSi} 、 E_{gRu} 和 E_{gHf} 分别代表气体分子吸附在本征硅烯、Ru掺杂硅烯和Hf掺杂硅烯上时的带隙宽度。

2.2.3 恢复时间

恢复时间指气体分子在特定温度下从基底材料上脱附所需要的时间,代表了一种气体传感器的可重复利用性。通过分析恢复时间,可以观察到环境温度改变时传感器吸附气体分子种类的变化,对于传感器的性能至关重要。恢复时间的大小要适中,恢复时间太大会导致材料重复利用率低下,恢复时间太小会导致气体分子无法稳定吸附在传感器上,影响传感器的气敏性能。

为了分析Ru、Hf原子掺杂的硅烯在吸附气体分子时的恢复时间,本文采用过渡态理论,定义恢复时间为

$$\tau = A^{-1} e^{-\frac{E_{ad}}{K_B T}} \quad (4)$$

其中, A 为尝试频率(其大小为 10^{12} s^{-1}); E_{ad} 为吸附能;

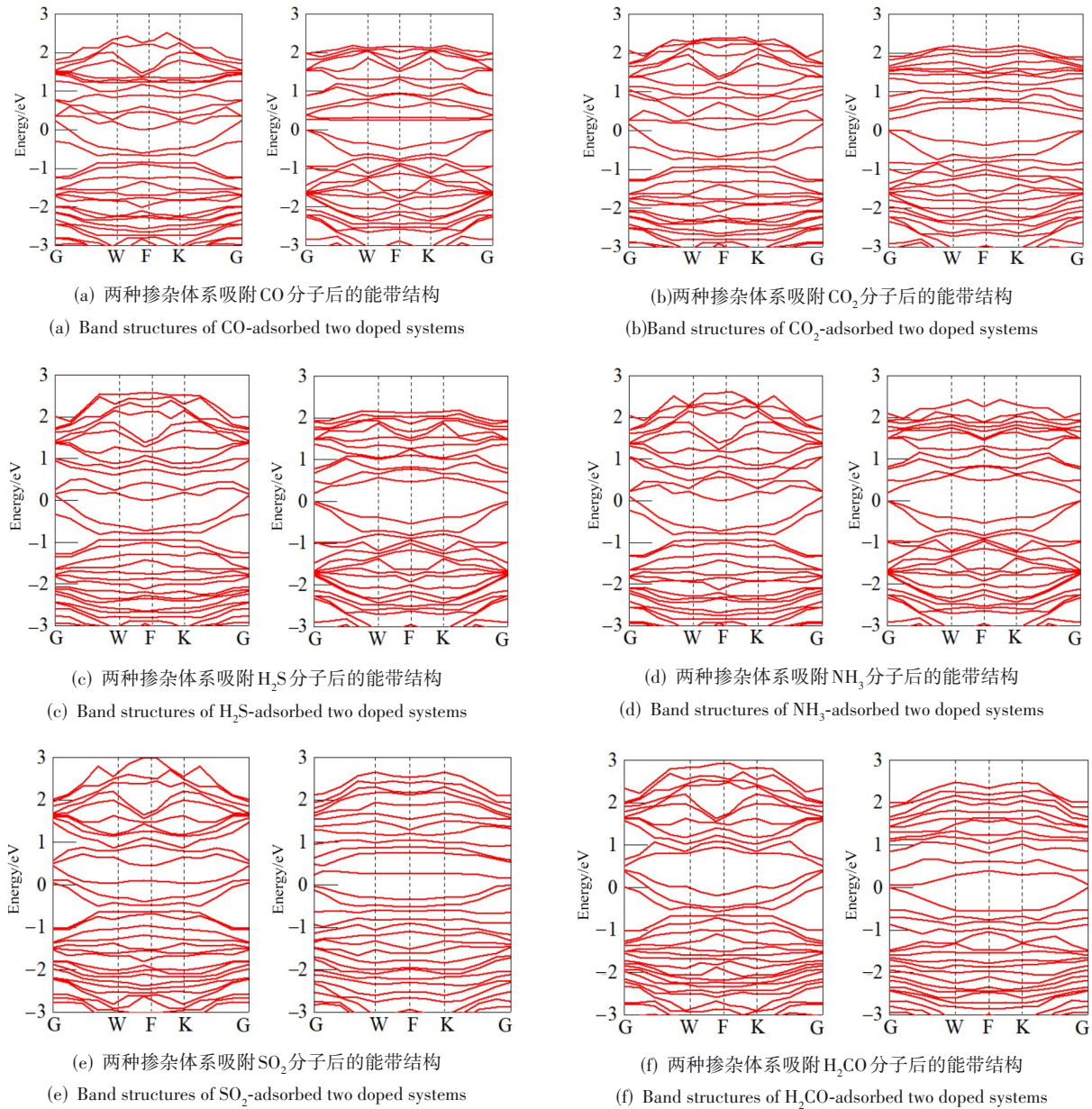


图5 六种气体吸附在Ru/Hf掺杂的硅烯表面的能带结构图

Figure 5 Band structure of different gas molecules adsorbed on the surface of Ru/Hf-doped silicene

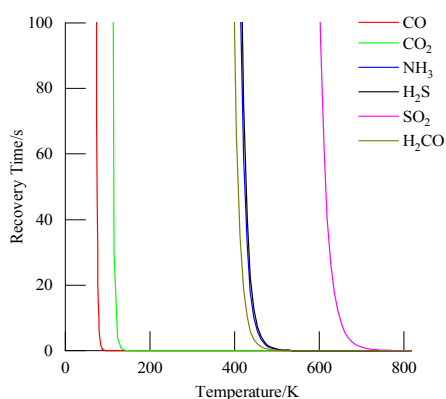
K_B 为玻尔兹曼常数(其值为 $8.62 \times 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{K}^{-1}$); T 为开尔文温度。

当温度变化时,不同气体分子吸附于不同掺杂体系上的恢复时间如图6所示。

对于Ru掺杂的硅烯表面吸附的气体分子,随着环境温度的升高,气体分子的恢复时间如下:CO在温度为80 K时的恢复时间为6.61 s,CO₂在温度为120 K时的恢复时间为9.50 s,H₂CO在温度为450 K时的恢复时间为2.62 s,NH₃在温度为460 K时的恢复时间为4.10 s,H₂S在温度为460 K时的恢复时间为4.99 s,SO₂在温度为680 K时的恢复时间为2.44 s。不难发

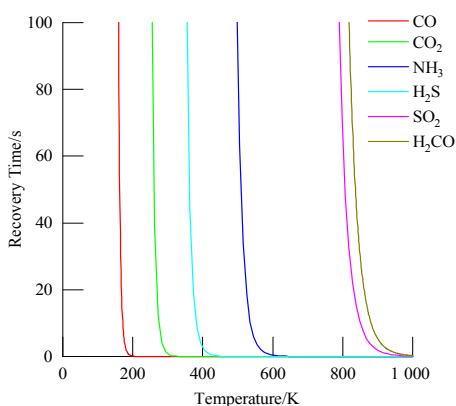
现,在Ru掺杂的硅烯体系中,CO与CO₂只能在环境温度较低时吸附于材料表面,而其余气体分子均在常温下就能吸附于气体表面,在温度升高到500 K时,H₂S、NH₃、H₂CO气体均脱附,SO₂气体分子在高温下才能脱附于材料表面。

在Hf掺杂硅烯表面吸附的气体分子中,H₂S在温度为160 K时的恢复时间为2.20 s,CO在温度为180 K时的恢复时间为2.38 s,CO₂在温度为280 K时的恢复时间为5.54 s,NH₃在温度为560 K时的恢复时间为2.79 s,H₂S在温度为460 K时的恢复时间为4.99 s,SO₂在温度为900 K时的恢复时间为1.97 s,H₂CO在温度



(a) 气体吸附在 Ru 掺杂体系上不同温度下的恢复时间

(a) Recovery time of gas adsorption on Ru-doped systems at different temperatures



(b) 气体吸附在 Hf 掺杂体系上不同温度下的恢复时间

(b) Recovery time of gas adsorption on Hf-doped systems at different temperatures

图 6 六种气体在不同体系上的恢复时间

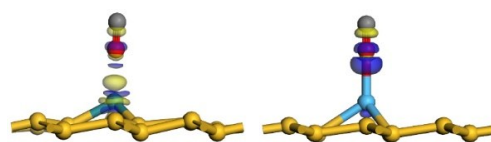
Figure 6 Recovery times of six gases on different systems

为 930 K 时的恢复时间为 2.07 s。可见, CO、CO₂ 均在环境温度较低时才能吸附于材料表面, SO₂、H₂S、NH₃、H₂CO 气体分子在室温下就可以稳定吸附于材料表面。

恢复时间的分析表明, 两种掺杂体系均可通过调控环境温度来选择基底材料吸附的气体分子, 实现气体传感器对气体分子的筛选, 是具有潜力的气体传感材料。

2.2.4 差分电荷分析

本文采用 Hirshfeld 方法计算了材料表面与气体分子间的电荷转移, 通过对比基底材料与气体分子间的电荷转移量, 来分析 Ru 原子和 Hf 原子的掺杂对硅烯气敏性能的影响。通常转移电荷的多少与吸附能的大小具有相关性, 吸附能越强, 转移的电荷也就越多。为了更加直观地对比电荷的转移, 图 7 中更加细致地描述了基底材料与气体分子间的电荷转移。其中的黄色区域代表得到电子的区域, 蓝色区域代表得到失去电子的区域, 图中等势面选取为 0.03 eV。



(a) Ru 掺杂与 Hf 掺杂体系吸附 CO 的差分电荷密度图

(a) Differential charge density of CO adsorption on Ru-doped and Hf-doped systems

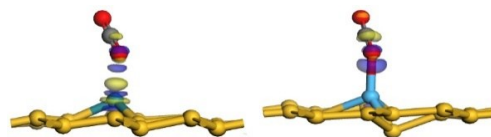
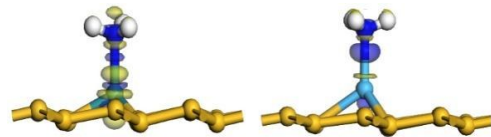
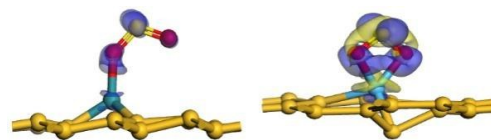
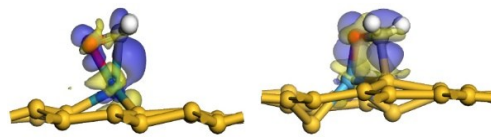
(b) Ru 掺杂与 Hf 掺杂体系吸附 CO₂ 的差分电荷密度图(b) Differential charge density of CO₂ adsorption on Ru-doped and Hf-doped systems(c) Ru 掺杂与 Hf 掺杂体系吸附 H₂S 的差分电荷密度图(c) Differential charge density of H₂S adsorption on Ru-doped and Hf-doped systems(d) Ru 掺杂与 Hf 掺杂体系吸附 NH₃ 的差分电荷密度图(d) Differential charge density of NH₃ adsorption on Ru-doped and Hf-doped systems(e) Ru 掺杂与 Hf 掺杂体系吸附 SO₂ 的差分电荷密度图(e) Differential charge density of SO₂ adsorption on Ru-doped and Hf-doped system(f) Ru 掺杂与 Hf 掺杂体系吸附 H₂CO 的差分电荷密度图(f) Differential charge density of H₂CO adsorption on Ru-doped and Hf-doped system

图 7 不同气体分子吸附在 Ru 掺杂硅烯和 Hf 掺杂硅烯的体系上的差分电荷密度图

Figure 7 Differential charge density of different gas molecules adsorbed on Ru-doped and Hf-doped silicene

气体吸附过程中产生的电荷转移 ΔQ 是气敏性能的重要微观指标。 ΔQ 的绝对值越大,表明材料表面载流子浓度受扰动越强,对导电性的调制越显著,从而灵敏度越高。表2展示了不同气体分子吸附在不同的体系后转移电荷的大小。由表2可知,本征硅烯在吸附不同气体分子后均发生了一定程度的电荷转移,但整体转移量较小($|\Delta Q| \leq 0.3 e$),说明气体分子与本征硅烯之间以范德华力作用为主,体系属于弱物理吸附。

表2 气体分子吸附在本征硅烯、Ru/Hf掺杂的硅烯上时体系的电荷转移数 ΔQ 单位:e

Table 2 Charge transfer(ΔQ) of gas adsorbed systems: pristine, Ru-doped, and Hf-doped silicene unit: e

Gas	ΔQ_{Si}	ΔQ_{Si+Ru}	ΔQ_{Si+Hf}
CO	0.10	0.08	0.12
CO ₂	0.01	0.14	0.21
H ₂ S	0.03	0.25	0.21
NH ₃	0.30	0.45	0.45
SO ₂	-0.15	-0.21	-0.21
H ₂ CO	-0.04	-0.13	-0.26

注: ΔQ_{Si} 、 ΔQ_{Si+Ru} 和 ΔQ_{Si+Hf} 分别代表气体分子吸附在本征硅烯、Ru掺杂硅烯和Hf掺杂硅烯上的电荷转移数。

对于 Ru 掺杂硅烯体系,气体吸附后的电荷转移量较本征硅烯明显提高,尤其在 H₂S、NH₃、SO₂ 等极性分子吸附中表现最为显著,最大转移量可达 0.45 e。说明 Ru 掺杂改变了硅烯表面的电子分布,使吸附过程中电子在界面重新分布更明显,从而增强了材料对气体的响应。相比之下,Hf 掺杂硅烯体系的电荷转移量整体更高,尤其对 CO₂、H₂S 及 H₂CO 的响应更为突出,表明 Hf 掺杂同样增强了界面电子耦合和局域极化效应,提高了对不同气体分子的响应能力和选择性。

从电荷转移方向来看,CO、CO₂、H₂S 和 NH₃ 的电荷转移量为正,说明气体分子从表面获得电子,属于电子受体型吸附;而 SO₂ 与 H₂CO 的电荷转移量为负,表明气体分子向表面提供电子,属于电子供体型吸附。这种电子得失差异导致了掺杂体系中费米能级移动方向的不同,从而引起导电率变化方向的差异,是材料对不同气体产生特征性响应的物理基础。

总体而言,掺杂过渡金属原子后,体系的电荷转移量显著增加,表明 Ru 与 Hf 的引入有效增强了硅烯与气体分子之间的电子相互作用,材料的载流子浓度发生显著变化,进而调制了体系的电导率,提高了体系的灵敏度。

2.2.5 功函数分析

本文通过第一性原理计算方法,计算吸附系统中的总能量。功函数是指将电子从材料的费米能级(E_F)提取到真空能级(E_{vac})所需的最小能量,通过将吸附体系的总能量相对于参考态能量(0 eV)进行调整,在达到平衡后确定真空能级。功函数的定义如式(5)所示:

$$\Phi = E_{vac} - E_F \quad (5)$$

其中, E_{vac} 代表真空能级; E_F 代表材料的费米能级。

气体分子吸附在基底材料表面后通常会引起基底材料表面电势的变化,表面电势的变化程度可由气体分子吸附前后体系的功函数的变化量来体现。通常来讲,功函数增大意味着电子从材料表面逸出到真空需求的能量更多,说明材料表面的电子亲合能提升;功函数减小表示电子逸出到真空的能量需求降低,材料表面电子亲合能降低。气体吸附引起的功函数变化 $\Delta\Phi$ 本质上反映了表面电荷转移与界面偶极矩变化的程度,是表面电子结构扰动的直接表征。 $|\Delta\Phi|$ 越大说明吸附过程对表面电子态影响越强,从而导致更显著的载流子浓度变化与电导调制,因此具有更高的气体灵敏度。

本文通过第一性原理计算,得出了本征硅烯、Ru 掺杂硅烯、Hf 掺杂硅烯三种体系在吸附气体分子前后的功函数。本征硅烯的功函数为 4.454 eV,Ru 掺杂硅烯的功函数为 4.532 eV,Hf 掺杂硅烯的功函数为 4.391 eV。三种体系吸附不同气体后的功函数如图 8 所示。

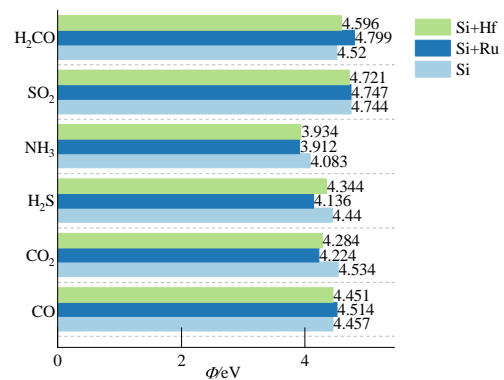


图8 六种气体分子吸附在本征硅烯、Ru掺杂硅烯、Hf掺杂硅烯上的功函数

Figure 8 Work function of pristine, Ru-doped, and Hf-doped silicene upon adsorption of six gas molecules

表3给出三种体系吸附气体的功函数变化幅度 $|\Delta\Phi|$ 。根据表3的功函数变化幅度数据可见,本征硅烯在吸附各种气体时的 $|\Delta\Phi|$ 较小,其中对 NH₃ 和 SO₂

的响应相对较强。引入 Ru 掺杂后,硅烯在吸附 NH_3 、 H_2S 、 CO_2 和 H_2CO 气体时的功函数变化明显增大,同时对应的电荷转移也有所增加,表明 Ru 掺杂增强了表面电子响应,从而提升了硅烯对这四种气体的气敏性能。相比之下,Hf 掺杂在吸附所有气体时均能增加功函数变化,且在 CO 和 SO_2 吸附下的增强效果优于 Ru 掺杂,说明 Hf 掺杂同样增强了表面电子响应,提升了硅烯对六种气体的气敏性,尤其对 CO 和 SO_2 的响应更为突出。

表3 本征硅烯、Ru 掺杂硅烯和 Hf 掺杂硅烯在吸附不同气体后的功函数变化幅度 $|\Delta\Phi|$ 单位:eV

Table 3 Variation amplitude of the work function for pristine, Ru-doped, and Hf-doped silicene upon different gas adsorption $|\Delta\Phi|$ unit: eV

Gas	$ \Delta\Phi _{\text{Si}}$	$ \Delta\Phi _{\text{Ru}}$	$ \Delta\Phi _{\text{Hf}}$
CO	0.003	0.018	0.060
CO_2	0.080	0.308	0.107
H_2S	0.014	0.396	0.047
NH_3	0.371	0.620	0.457
SO_2	0.290	0.215	0.330
H_2CO	0.066	0.267	0.205

注: $|\Delta\Phi|_{\text{Si}}$ 、 $|\Delta\Phi|_{\text{Ru}}$ 和 $|\Delta\Phi|_{\text{Hf}}$ 分别代表本征硅烯、Ru 掺杂硅烯和 Hf 掺杂硅烯在吸附气体分子时功函数的变化值。

2.2.6 态密度分析

通过分析吸附气体后的材料态密度 (Density of States, DOS),了解电子态在不同能级上的分布及吸附对电子结构的影响。态密度分为总态密度 (Total Density of States, TDOS) 和分波态密度 (Partial Density of States, PDOS)。TDOS 反映了体系内所有电子态在能量上的分布情况,可以辅助了解材料的能带结构,并用于估算禁带宽度,同时显示费米能级附近电子态的分布特征;PDOS 将 TDOS 的电子态分布进一步细化,能够清晰地展示特定原子或轨道对材料电子性质的影响。通过分析 TDOS 和 PDOS,可以更深入地了解 Ru 掺杂与 Hf 掺杂对硅烯气体传感性能的影响。

过渡金属原子 Ru、Hf 在 d 轨道上的电子活性较高,H 原子只有 1 s 轨道被电子占据,C 原子、O 原子和 S 原子的 2p 轨道上的电子较为活跃,将上述原子特定的轨道作为参考构建 PDOS 图,图 9 给出了 CO 、 CO_2 、 H_2S 、 NH_3 、 H_2S 、 H_2CO 气体分子吸附后三种体系的态密度图。

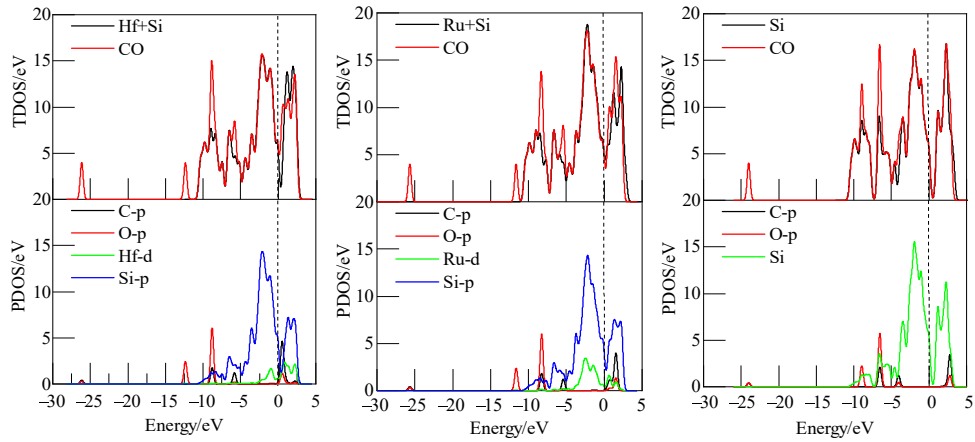
从图 9 中可以看出,本征硅烯吸附 CO_2 、 H_2S 、 SO_2 、 H_2CO 和 CO 气体分子时,体系的 TDOS 几乎没有变化,对应的 PDOS 显示 Si 原子的 p 轨道与气体原子轨道几

乎无交叠,且吸附能低、吸附距离较长,表明这些气体与本征硅烯主要发生弱物理吸附,未形成化学键。吸附 NH_3 时,Si 的 p 轨道与 N 的 p 轨道在 $-5\sim-10$ eV 区间出现了微弱重叠,同时吸附距离短,吸附能略高,表明 NH_3 与本征硅烯之间存在弱化学相互作用,但仍不够稳定形成强化学键。

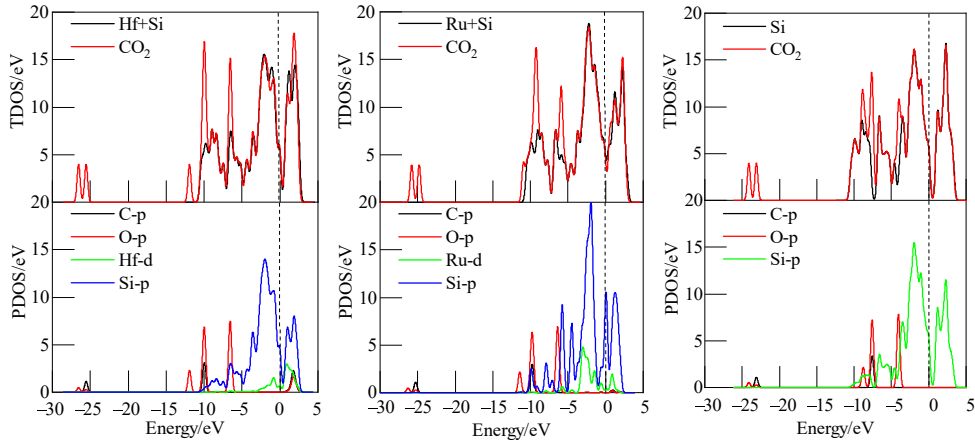
对于 Ru、Hf 原子掺杂的硅烯,从图 9 中可以看出,两种过渡金属原子掺杂后的硅烯在吸附所有气体分子后,TDOS 图都产生了一定变化,下面通过分析 PDOS 图来解释气体分子与基底材料之间化学键的成因以及 TDOS 图变化的原因。

在图 9(a)中,Ru、Hf 原子掺杂的硅烯在吸附 CO 气体分子后,新出现的波峰分别出现在 -8 eV、 $+2$ eV 左右的能级处,在 $+2$ eV 的能级处,Ru、Hf 原子的 d 轨道与 O 原子的 p 轨道发生交叠,分别形成了配位键与化学键,TDOS 图的变化主要由 O 原子的 p 轨道导致。从图 9(b)中可以发现,Ru 掺杂硅烯在吸附 CO_2 气体分子时,Ru 原子的 d 轨道在 $+1$ eV 的能级处与 O 原子的 p 轨道有所交叠,Ru 掺杂的硅烯体系均与 CO_2 气体分子中的 O 原子形成了配位键,Hf 原子的 d 轨道并未与 C、O 原子的 p 轨道明显重叠,解释了 Hf 掺杂的硅烯与 CO_2 间的物理吸附,TDOS 图的变化主要由 O 原子的 p 轨道引起。图 9(c)中可以看出,在 $-4\sim-7$ eV 能量区间,Ru、Hf 原子的 d 轨道与 S 原子的 p 轨道的波峰交叠,解释了两种掺杂体系在吸附 H_2S 气体分子时,Ru、Hf 原子与 S 原子化学键的形成,TDOS 图的变化主要源于 S 原子的 p 轨道。图 9(d)中可以发现,Ru、Hf 原子的 d 轨道在 -6 eV 的能级处与 N 原子的 p 轨道的波峰有所交叠,TDOS 图中 -9.5 eV 能级的波峰的变化是 NH_3 吸附时,N 原子的 p 轨道与 H 原子的 s 轨道杂化导致的。图 9(e)中可以发现,O 原子与 Ru、Hf 原子之间化学键的形成主要是由于 -5 eV 能级处波峰的交叠。图 9(f)中可以发现,在 -6 eV 的能级处,Ru、Hf 原子的 d 轨道与 C、O 原子 p 轨道明显交叠,这分别解释了 C、O 原子与 Ru、Hf 原子间的化学键的形成,两种掺杂体系 TDOS 图的变化主要由 C 原子的 p 轨道引起。

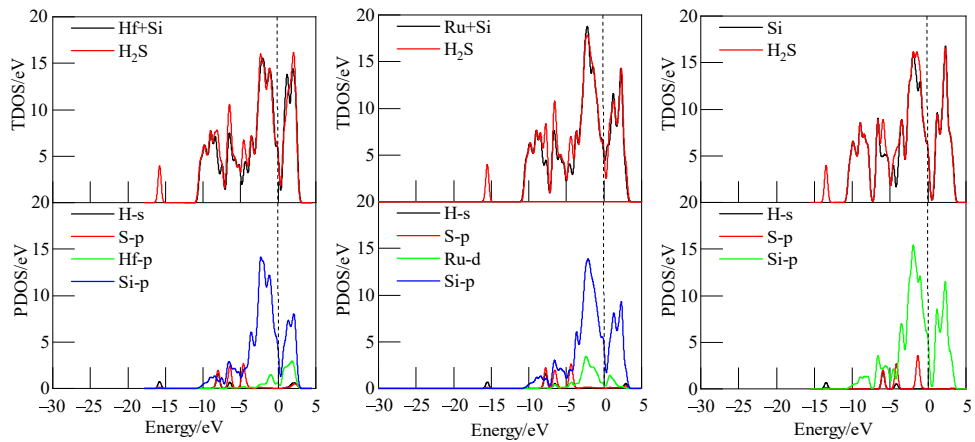
通过 TDOS 和 PDOS 的分析可知,Ru、Hf 掺杂显著增强了硅烯对各类气体分子的吸附能力,掺杂原子 d 轨道与气体分子活性原子轨道的杂化在费米能级附近或较深能级均可观察到,解释了化学键形成及 TDOS 变化的来源。结合吸附能和吸附距离的分析,两种掺杂体系在电子结构上对气体分子具有明显响应,表明它们具有潜在的高灵敏气体传感特性。



(a) CO吸附在三种体系上的TDOS和PDOS图
(a) TDOS and PDOS of CO adsorbed on three systems

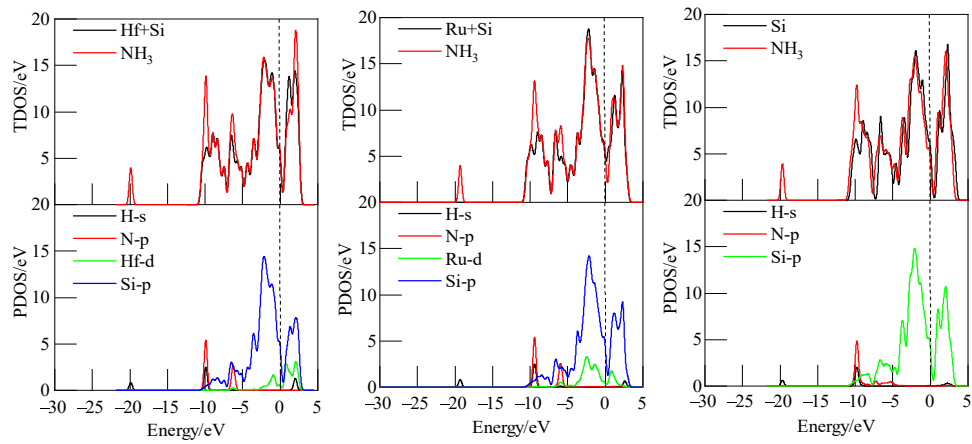
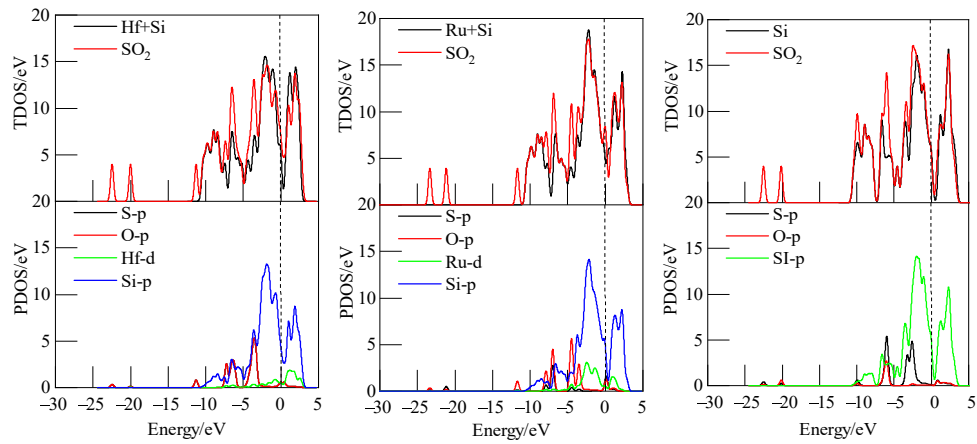
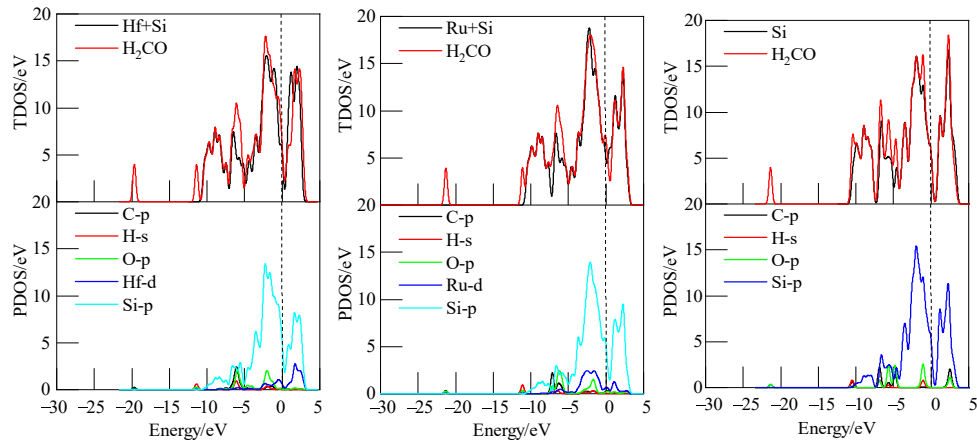


(b) CO₂吸附在三种体系上的TDOS和PDOS图
(b) TDOS and PDOS of CO₂ adsorbed on three systems



(c) H₂S吸附在三种体系上的TDOS和PDOS图
(c) TDOS and PDOS of H₂S adsorbed on three systems

图9 六种气体在本征硅烯、Ru掺杂硅烯、Hf掺杂硅烯上的TDOS图与PDOS图
Figure 9 TDOS and PDOS of six gas molecules on pristine, Ru-doped, and Hf-doped silicene

(d) NH_3 吸附在三种体系上的 TDOS 和 PDOS 图(d) TDOS and PDOS of NH_3 adsorbed on three systems(e) SO_2 吸附在三种体系上的 TDOS 和 PDOS 图(e) TDOS and PDOS of SO_2 adsorbed on three systems(f) H_2CO 吸附在三种体系上的 TDOS 和 PDOS 图(f) TDOS and PDOS of H_2CO adsorbed on three systems

续图 9

3 结论

本文基于第一性原理密度泛函理论的计算方法, 计算并分析了六种气体分别在本征硅烯和 Ru、Hf 原子掺杂的硅烯上的吸附结构与吸附能、能带结构、恢复时间、差分电荷、功函数和态密度。

气体传感器的宏观性能主要有灵敏度、选择性等, 灵敏度通常定义为材料在吸附气体后电学性质变化的相对幅度, 而选择性则用于衡量材料区分不同气体分子的能力。尽管本文主要基于微观计算, 但所计算分析的吸附能、恢复时间、电荷转移、功函数、能带结构和态密度等参数可以间接反映材料的灵敏度和选择性。

材料的灵敏度主要取决于气体吸附后对载流子浓度、电导率和迁移率的相对变化。具体而言, 吸附能越大, 气体与材料结合越牢固, 引起的载流子浓度或迁移率变化越明显, 灵敏度则越高; 电荷转移量增大也会显著调节载流子浓度, 增强灵敏度; 能带结构的调节(如禁带宽度变化或费米能级移动)改变载流子浓度和迁移率, 使电学响应更强; 功函数的变化进一步解释了载流子浓度的变化趋势与程度; 适当的恢复时间保证吸附信号充分, 增强有效灵敏度; 态密度或轨道杂化在费米能级附近引入新态, 使载流子对气体的响应更加敏感, 从而整体提升材料的灵敏度。

通过第一性原理计算发现, 本征硅烯仅能与 NH_3 形成化学键, 其余气体吸附较弱; Ru 掺杂硅烯对大部分气体形成化学键, CO 和 CO_2 表现为物理吸附; Hf 掺杂硅烯对所有气体均形成化学键。能带结构分析显示, 本征硅烯保持准金属性, Ru 掺杂保持金属性, Hf 掺杂呈半导体特性, 表明 Hf 掺杂硅烯可通过导电率变化区分气体。吸附能与恢复时间分析表明, 两种掺杂体系可通过调控环境温度选择性吸附气体; 电荷转移、功函数变化及态密度调控增强了载流子对气体的响应, 从而提升灵敏度和选择性。

综上, Ru、Hf 掺杂均提高了硅烯对 CO、 CO_2 、 SO_2 、 H_2CO 、 H_2S 、 NH_3 的灵敏度和选择性。Ru 掺杂可通过载流子浓度和迁移率变化筛分气体, Hf 掺杂可结合导电率变化和环境温度实现更优的气体筛分性能, 相比之下, Hf 掺杂的硅烯对气体分子的选择性更加优异。

参考文献

- [1] Zhu Shuwen, Fan Huiqing, Dong Peizhi, et al. PEDOT: PSS@ WO_3 p-n heterojunction sensor for enhanced triethylamine detection at room temperature[J]. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2025, 13(5): 118099.
- [2] Zhu Shuwen, Fan Huiqing, Su Yao, et al. Ultrahigh triethylamine sensitivity of WO_3 - MoO_3 n-n heterojunction sensor operating at low-temperature[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2025, 507: 160607.
- [3] Tian Hailin, Fan Huiqing, Li Mengmeng, et al. Zeolitic imidazolate framework coated ZnO nanorods as molecular sieving to improve selectivity of formaldehyde gas sensor[J]. *ACS Sensors*, 2016, 1(3): 243-250.
- [4] Zhang Dongzhi, Pan Wenjing, Tang Mingcong, et al. Diversiform gas sensors based on two-dimensional nanomaterials[J]. *Nano Research*, 2023, 16(10): 11959-11991.
- [5] 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.
- [6] Lin Xianqing, Ni Jun. Much stronger binding of metal adatoms to silicene than to graphene: A first-principles study[J]. *Physical Review B*, 2012, 86(7): 075440.
- [7] Zhao Chunjiang, Wu Huarui. A first-principles study on the interaction of biogas with noble metal (Rh, Pt, Pd) decorated nitrogen doped graphene as a gas sensor: A DFT study[J]. *Applied Surface Science*, 2018, 435: 1199-1212.
- [8] Abd-alkader R, Hassen A, Maarouf A A, et al. Transition metal substitutional doping of graphene nanomeshes: Structural, electronic, and magnetic properties[J]. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2025, 191: 109355.
- [9] Nahali M, Gopal F. First principles study of oxygen adsorption on nickel-doped graphite[J]. *Molecular Physics*, 2012, 110(13): 1437-1445.
- [10] Dong Haikuan, Wang Yongping, Shi Libin. First principles study of HCN adsorption on graphene doped with 5D transition metal[J]. *Surface Review and Letters*, 2016, 23(1): 1550095.
- [11] Salih E, Ayesh A I. Pt-doped armchair graphene nanoribbon as a promising gas sensor for CO and CO_2 : DFT study[J]. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2021, 125: 114418.
- [12] 马欢, 马玲, 张建民. 改性石墨烯 HCN 气敏特性的第一性原理研究[J]. *云南大学学报(自然科学版)*, 2018, 40(5): 961-970.
Ma Huan, Ma Ling, Zhang Jianmin. First principles study of the HCN gas sensitivity of modified graphene[J]. *Journal of Yunnan University (Natural Sciences Edition)*, 2018, 40(5): 961-970. (in Chinese)
- [13] 蔡乐, 王华平, 于贵. 石墨烯带隙的调控及其研究进展[J]. *物理学进展*, 2016, 36(1): 21-33.
Cai Le, Wang Huaping, Yu Gui. Modifying bandgap of graphene and its recent developments[J]. *Progress in*

- Physics, 2016, 36(1): 21-33. (in Chinese)
- [14] 俞冯, 李卫, 任青颖, 等. Ge 掺杂磷烯材料吸附气体分子的第一性原理研究[J]. 电子学报, 2025, 53(3): 800-810.
Yu Feng, Li Wei, Ren Qingying, et al. First principles study on the adsorption of gas molecules on Ge doped phosphorene materials[J]. Acta Electronica Sinica, 2025, 53(3): 800-810. (in Chinese)
- [15] Tiwari A, Bahadursha N, Palepu J, et al. Comparative analysis of Boron, nitrogen, and phosphorous doping in monolayer of semi-metallic Xenos (Graphene, Silicene, and Germanene) - A first principle calculation based approach[J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2023, 153: 107121.
- [16] 赵亚运, 王志勇, 孙梦瑶, 等. 掺杂对硅烯的性能影响[J]. 原子与分子物理学报, 2017, 34(4): 656-667.
Zhao Yayun, Wang Zhiyong, Sun Mengyao, et al. The impact on the properties of silicene with dopants[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2017, 34(4): 656-667. (in Chinese)
- [17] Wang Yusheng, Zheng Rui, Gao Haiyan, et al. Metal adatoms-decorated silicene as hydrogen storage media[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2014, 39(26): 14027-14032.
- [18] Bao Aida, Li Xuechao, Guo Xin, et al. Tuning the structural, electronic, mechanical and optical properties of silicene monolayer by chemical functionalization: A first-principles study[J]. Vacuum, 2022, 203: 111226.
- [19] Kalwar B A, Wang Fangzong, Ahmed I, et al. Ti atom doped single vacancy silicene for hydrogen energy storage: DFT study[J]. Journal of the Chinese Chemical Society, 2021, 68(12): 2243-2253.
- [20] Nguyen D K, Hoang D Q, Hoat D M. Exploring a silicene monolayer as a promising sensor platform to detect and capture NO and CO gas[J]. RSC Advances, 2022, 12(16): 9828-9835.
- [21] Tang Xiao, Li Wei, Xu Wei, et al. First-principles study on the adsorption of gas molecules on Fe, Ti-Doped silicene[J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2024, 184: 108797.
- [22] Xiao Yanjun, Lu Xiaoqing, Ng S P, et al. Trivacancy and Stone-Wales defected silicene for adsorption of small gas molecules[J]. Computational Materials Science, 2018, 154: 276-283.
- [23] Liang Benquan, Li Wei, Ren Qingyin, et al. Gas adsorption performance of Ta doped MoSe₂ based on first principles[J]. Results in Physics, 2022, 42: 105978.
- [24] 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.
- [25] Perdew J P, Chevary J A, Vosko S H, et al. Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation[J]. Physical Review B, 1992, 46(11): 6671-6687.
- [26] Huang Zongyu, Liu Huating, Hu Rong, et al. Structures, properties and application of 2D mono-elemental materials (Xenes) as graphene analogues under defect engineering[J]. Nano Today, 2020, 35: 100906.
- [27] Wang Yu, Wang Ling, Zhang Xin, et al. Two-dimensional nanomaterials with engineered bandgap: Synthesis, properties, applications[J]. Nano Today, 2021, 37: 101059.
- [28] Lee Y, Yun K H, Cho S B, et al. Electronic properties of transition-metal-decorated silicene[J]. ChemPhysChem, 2014, 15(18): 4095-4099.
- [29] Pamungkas M A, Maftuhin W. Electronic structures of silicene doped with gallium: First principle study[J]. MATEC Web of Conferences, 2015, 30: 03003.
- [30] Wang Rong, Xu Mingsheng, Pi Xiaodong. Chemical modification of silicene[J]. Chinese Physics B, 2015, 24(8): 086807.
- [31] Prasongkit J, Amorim R G, Chakraborty S, et al. Highly sensitive and selective gas detection based on silicene[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2015, 119(29): 16934-16940.
- [32] Ko J K, Park I H, Hong K, et al. Recent advances in chemoresistive gas sensors using two-dimensional materials[J]. Nanomaterials, 2024, 14(17): 1397.
- [33] Yang Lunwei, Xiao Wei, Wang Jianwei, et al. Formaldehyde gas sensing properties of transition metal-doped graphene: A first-principles study[J]. Journal of Materials Science, 2021, 56(21): 12256-12269.
- [34] Wang Hui, Zhou Qingxiao, Ju Weiwei, et al. Effect of vacancy defect and dopants on the sensitivity of germanene to H₂CO[J]. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 2022, 142: 115268.
- [35] 韩靖松, 任青颖, 李金泽, 等. Ti 掺杂黑磷烯吸附气体的第一性原理研究[J]. 微纳电子技术, 2025, 62(10): 64-75.
Han Jingsong, Ren Qingying, Li Jinze, et al. First-principles study on the gas adsorption of Ti-doped black phosphorene[J]. Micronanoelectronic Technology, 2025, 62(10): 64-75. (in Chinese)
- [36] Ye Li, Liang Yongchao. Study on highly selective NO₂ gas sensors based on (Fe, Mo)-doped monolayer WSe₂[J]. Chinese Journal of Physics, 2024, 92: 593-606.

作者简介



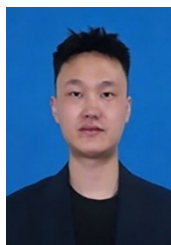
渠子轩 男,2001年3月出生于青海省西宁市。现为南京邮电大学集成电路科学与工程学院(产教融合学院)硕士研究生。主要研究方向为半导体纳米器件材料的吸附性能。

E-mail: 1223228009@njupt.edu.cn



石家乐 男,2001年9月出生于甘肃省庆阳市。现为南京邮电大学集成电路科学与工程学院(产教融合学院)硕士研究生。主要研究方向为半导体纳米器件材料的吸附性能。

E-mail: 1223228011@njupt.edu.cn



许巍 男,1993年1月出生于安徽省阜阳市。现为南京邮电大学讲师、研究生导师。主要研究方向为高性能摩擦纳米发电机以及摩擦电功能材料。中国电子学会会员编号:

E190199400M。

E-mail: wxu@njupt.edu.cn



任青颖 女,1987年1月出生于内蒙古自治区赤峰市。现为南京邮电大学讲师、研究生导师。主要研究方向为微纳传感器器件的设计和加工、二维纳米材料传感器、气体传感器技术。

E-mail: rqy@njupt.edu.cn



李金泽 男,1989年4月出生于江苏省无锡市。现为南京邮电大学讲师、研究生导师。主要研究方向为铜基、钙钛矿基光电薄膜器件。

E-mail: lijinze@njupt.edu.cn



李卫 男,1980年10月出生于江苏省江阴市。现为南京邮电大学党委人才工作部部长、人才工作处处长、博士、教授、博士研究生导师。主要研究方向为半导体纳米器件材料的制备和光电性能、纳米结构和纳米材料的制备及性能。

E-mail: liw@njupt.edu.cn