

DOI:10.16356/j.1005-2615.2022.04.019

含晶界单层过渡金属硫化物的压电效应研究

王东, 浦鸣杰

(南京航空航天大学航空学院, 南京 210016)

摘要: 在单层过渡金属硫化物(Transition metal dichalcogenides, TMDs)的合成过程中,缺陷是不可避免的,而且缺陷对单层 TMDs 的物理化学性质有着重要的影响。为了研究晶界(Grain boundaries, GBs)对单层 TMDs 压电效应的影响,基于密度泛函理论(Density functional theory, DFT),计算了 36 种含晶界单层 TMDs 和 36 种不含晶界单层 TMDs 的压电系数。结果表明:晶界的存在会增强单层 TMDs 的压电效应,这是由于晶界会导致体系产生应变梯度,从而激发了挠曲电效应。压电系数的变化呈现明显的周期趋势,即随着硫族元素相对原子质量的增加压电系数逐渐增大,其中,含晶界的单层 MoTe_2 的压电系数最大为 11.17 pm/V,与单层 MoTe_2 (8.74 pm/V)相比,提高了约 27.8%。本文的研究结果可以为开发应用于飞行器中的高灵敏度传感器和高精度控制器的设计提供理论指导。

关键词: 单层过渡金属硫化物;晶界;压电效应;压电系数;密度泛函理论

中图分类号:O472

文献标志码:A

文章编号:1005-2615(2022)04-0723-06

Piezoelectric Effect of Monolayer Transition Metal Dichalcogenides with Grain Boundaries

WANG Dong, PU Mingjie

(College of Aerospace Engineering, Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: Defects are inevitable in the synthesis of monolayer transition metal dichalcogenides (TMDs) and will impose important influence on the physical and chemical properties of monolayer TMDs. In order to study the influence on the piezoelectric effect of monolayer TMDs with grain boundaries (GBs), the piezoelectric coefficients of 36 kinds of monolayer TMDs with GBs and 36 kinds of perfect monolayer TMDs are calculated based on density functional theory (DFT). The results show that the GBs enhance the piezoelectric effect of monolayer TMDs. This is owing to that GBs lead to strain gradients and the flexoelectricity is triggered. The change in piezoelectric coefficients shows an obvious periodic trend. The piezoelectric coefficient increases gradually with the relative atomic mass of chalcogenide elements increase. The maximum piezoelectric coefficient of monolayer MoTe_2 with GBs is 11.17 pm/V, which is enhanced about 27.8% compared with that of the perfect MoTe_2 (8.74 pm/V). These results provide a theoretical guidance for the development of high-sensitivity sensors and high-precision controllers in aircraft.

Key words: monolayer transition metal dichalcogenides; grain boundary; piezoelectric effect; piezoelectric coefficient; density functional theory

基金项目: 国家自然科学基金(11972186, 11890674, 51921003); 中央高校基本科研业务费专项资金(NE2019001); 江苏省高等学校学科建设重点项目。

收稿日期: 2020-11-30; **修订日期:** 2021-03-23

通信作者: 王东, 男, 硕士, E-mail: 15851817100@qq.com。

引用格式: 王东, 浦鸣杰. 含晶界单层过渡金属硫化物的压电效应研究[J]. 南京航空航天大学学报, 2022, 54(4): 723-728. WANG Dong, PU Mingjie. Piezoelectric effect of monolayer transition metal dichalcogenides with grain boundaries [J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, 2022, 54(4): 723-728.

随着航空航天科技的不断发展,传感器、控制器等智能器件在各类飞行器以及结构健康监测中发挥着举足轻重的作用,这些器件的构成大多以压电材料为主^[1-3]。自2004年石墨烯问世以来^[4],越来越多的二维材料被制备出来,其中单层过渡金属硫化物(Transition metal dichalcogenides, TMDs)以其优异的物化性质受到广泛的关注和研究^[5-7],单层TMDs具有三原子层结构,由于其不具有中心对称性,因此具有压电效应^[8-9]。

关于TMDs的压电效应国内外专家学者做了大量的研究工作。Duerloo等^[8]通过基于密度泛函理论(Density functional theory, DFT)DFT的第一性原理计算了6种单层TMDs的压电系数,发现其产生的压电响应要优于传统的无机压电材料和氮化硼(Boron nitride, BN),并且呈现出单调的周期趋势,即随着硫族元素相对原子质量的增加压电系数逐渐增大。Blonsky等^[10]通过基于DFT的第一性原理计算了包括单层TMDs在内的37种二维材料的面内压电系数和其中5种材料的面外压电系数,通过比较15种TMDs的压电系数,发现其与硫族原子和金属原子极化率的比值成比例。Zhou等^[11]发现对于奇数层的MoS₂薄片,由于缺少中心对称性,因此存在压电响应,而对于偶数层MoS₂薄片,由于结构存在中心对称性,因此没有表现出压电响应。Dong等^[12]计算分析了单层以及多层具有2H相结构的“双面神”Janus MXY(M=Mo/W, X/Y=S/Se/Te, 金属原子M夹在两侧不同种类的硫族元素X/Y之间)的压电效应,对于单层MXY,通过单轴拉伸可以产生较强的面内压电响应,而离面压电响应较弱;对于多层MXY,可以获得较强的离面压电响应,其中MoSTe的离面压电系数最大,为10.575 pm/V。Wu等^[13]利用一种由单层MoS₂组成的柔性装置首次通过实验观测到了二维MoS₂的压电特性,该柔性装置被周期性地拉伸和释放就会在外部电路中产生交替性的压电输出。最近,Dai等^[14]利用由类似蝴蝶形状的含晶界的单层MoS₂组成的柔性装置通过实验发现晶界可以增强单层MoS₂的压电效应,与不含晶界的单层MoS₂相比,其压电输出功率提高了约50%。

在单层TMDs的制备过程中,难免会产生缺陷,其中晶界是常见的一种缺陷结构^[15-17]。研究发现,晶界可以调控单层MoS₂的磁性^[17]和带隙^[18],虽然实验中发现含晶界单层MoS₂的压电效应要优于不含晶界的单层MoS₂,但是没有测出其压电系数,也并没有给出其影响机理^[14]。本文通过基于的第一性原理计算了72种单层TMDs的压电系数,其中包括6种不含缺陷的单层TMDs、6种含晶界的单层TMDs、30种不含晶界的横向TMDs异

质结构和30种含晶界的横向TMDs异质结构,结果发现晶界的存在可以有效增强单层TMDs的压电效应,并且阐明了晶界对单层TMDs压电效应的影响机理。

1 原理与方法

1.1 二维材料的压电效应

压电效应本质上是极化和应变之间的线性耦合,即应变产生极化^[10,19]

$$P_i = e_{ijk}\epsilon_{jk} = d_{ijk}\sigma_{jk} \quad (1)$$

式中: P_i 、 e_{ijk} 、 d_{ijk} 、 ϵ_{jk} 、 σ_{jk} 分别为极化强度张量、压电应力系数张量、压电应变系数张量、应变张量和应力张量。

根据固体物理理论,材料的弹性模量 C_{ijkl} 是四阶张量,即

$$C_{ijkl} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \epsilon_{kl}} \quad (2)$$

二维材料的弹性模量张量 C_{ijkl} 以及压电系数张量 e_{ijk} 和 d_{ijk} 可以分别转化为 C_{ij} 、 e_{ij} 、 d_{ij} 。在本文中,单层TMDs具有 D_{3h} 点群对称性,因此 C_{ij} 、 e_{ij} 和 d_{ij} 有

$$d_{yy} = \frac{e_{yy}}{C_{yy} - C_{xy}} \quad (3)$$

式中下标 x 、 y 表示 x 方向和 y 方向。

1.2 建模与计算

初始模型的建立在Materials Studio中进行,结构的弛豫、静态自洽以及极化计算等均是在基于DFT并且采用PBE Perdew-Burke-Ernzerhof交换相关泛函和投影缀加波(Projected augmented wave, PAW)的原子尺度材料模拟的计算机程序包(Vienna Ab-initio simulation package, VASP)^[20-21]中实现。

(1) 建立模型

在Materials Studio中构建初始模型并导出原子坐标,如图1(a~d)所示分别为单层MX₂、单层MX₂+NY₂横向异质结、单层含晶界MX₂(GB)以及单层含晶界MX₂+NY₂(GB)横向异质结,NY₂表示异质结构,其中M/N=Mo/W, X/Y=S/Se/Te,绿色虚线矩形框代表一个单胞, x 和 y 方向为周期性结构, z 方向为真空层。粉色的原子表示M,绿色的原子表示N,橙色的原子表示X,黄色的原子表示Y。

(2) 结构弛豫

首先采用共轭梯度法优化晶格常数,然后固定晶格常数,优化原子位置,其中平面波截断半径均设置为500 eV, k 点使用 $3 \times 3 \times 1$ 的 Γ 网格,收敛准则采用力收敛准则,即每个原子上的力要小于0.01

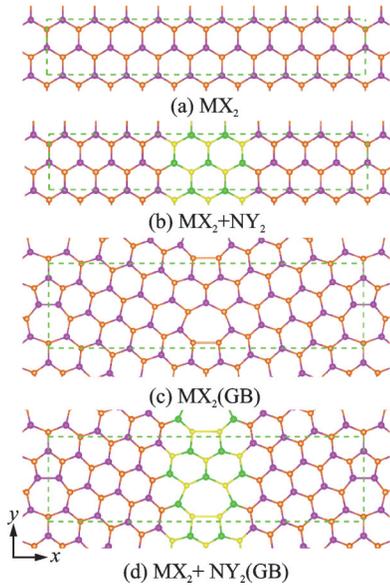


图1 单层的优化构型

Fig.1 Relaxed monolayer structures

$\text{eV}/\text{\AA}$, 能量收敛精度为 10^{-5} eV 。为了消除层间的相互作用,真空层厚度均在 20 \AA 以上。

(3) 自洽计算

在结构弛豫的基础上,增加 k 点网格划分密度,使用 $5 \times 5 \times 1$ 的 Γ 网格进行自洽计算。

(4) 极化计算

在 y 方向施加 5 组不同的单轴拉伸应变,采用 Berry phase^[22] 方法,计算相对模型质心的 y 向偶极矩 D_y 和极化强度 P_y 。

2 结果分析

为了确保含晶界单层 TMDs 在热力学上稳定,按照式(4)计算了 6 种单层 $\text{MX}_2(\text{GB})$ 的形成能 E_f^{unit} ,其定义为

$$E_f^{\text{unit}} = \frac{1}{m} E_{\text{total}} - \mu_M - 2\mu_X \quad (4)$$

式中: E_f^{unit} 为单位 MX_2 的形成能, μ_M 为金属元素 M 的化学势, μ_X 为硫族元素 X 的化学势, m 为 M 原子的数量, M 和 X 的化学势 μ 见表 1。表 2 列出了 6 种单层 MX_2 (晶界(Grain boundary, GB))的晶格参数 $a(x$ 方向)、 $b(y$ 方向)和形成能 E_f^{unit} ,可以发现,所有单层 $\text{MX}_2(\text{GB})$ 的形成能均为负值,说明其形成过程是放热反应,因此均具有热力学稳定性。

如图 2 所示为 6 种单层 MX_2 (晶界(Grain boundary, GB))在 y 方向受到单轴拉伸作用时引起

表 1 金属元素 M 和硫族元素 X 的化学势

Table 1 Chemical potential of transition metal elements M and chalcogens X

| 元素 | Mo | W | S | Se | Te |
|-----------------|-------|-------|------|------|------|
| μ/eV | 10.86 | 12.96 | 4.13 | 3.49 | 3.14 |

表 2 单层 $\text{MX}_2(\text{GB})$ 的晶格参数 a, b 和形成能 E_f^{unit}

Table 2 Lattice parameters a, b and formation energy E_f^{unit} of monolayer $\text{MX}_2(\text{GB})$

| 参数 | $a/\text{\AA}$ | $b/\text{\AA}$ | $E_f^{\text{unit}}/\text{eV}$ |
|----------------------------|----------------|----------------|-------------------------------|
| $\text{MoS}_2(\text{GB})$ | 31.45 | 8.47 | -2.41 |
| $\text{MoSe}_2(\text{GB})$ | 32.81 | 8.82 | -1.90 |
| $\text{MoTe}_2(\text{GB})$ | 35.28 | 9.42 | -0.72 |
| $\text{WS}_2(\text{GB})$ | 31.50 | 8.46 | -2.19 |
| $\text{WSe}_2(\text{GB})$ | 32.84 | 8.82 | -1.47 |
| $\text{WTe}_2(\text{GB})$ | 35.33 | 9.43 | -0.06 |

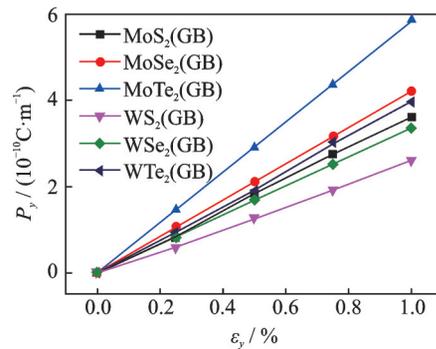


图 2 不同单轴应变下 6 种单层 $\text{MX}_2(\text{GB})$ 的极化强度 P_y 与应变 ϵ_y 的关系

Fig.2 Polarization P_y of six kinds of monolayer $\text{MX}_2(\text{GB})$ under different uniaxial strain ϵ_y

的极化强度 P_y 与应变 ϵ_y 的关系,其斜率即为压电应力系数 e_{yy} ,可以发现,在相同应变作用下,单层 $\text{MoTe}_2(\text{GB})$ 的极化最强,单层 $\text{WS}_2(\text{GB})$ 的极化最弱。表 3 列出了 6 种含晶界 TMDs 和 6 种不含晶界单层 TMDs 的弹性模量 C_{yy}, C_{xy} 和压电应变系数 d_{yy} 值。

表 3 含晶界 TMDs 和不含晶界单层 TMDs 的弹性模量 C_{yy}, C_{xy} (单位: N/m)和压电系数 d_{yy}

Table 3 Elastic modulus C_{yy}, C_{xy} and piezoelectric coefficient d_{yy} of monolayer TMDs with GBs and TMDs without GBs

| 参数 | $C_{yy}/(\text{N}\cdot\text{m}^{-1})$ | $C_{xy}/(\text{N}\cdot\text{m}^{-1})$ | $d_{yy}/(\rho\text{m}\cdot\text{V}^{-1})$ | 参数 | $C_{yy}/(\text{N}\cdot\text{m}^{-1})$ | $C_{xy}/(\text{N}\cdot\text{m}^{-1})$ | $d_{yy}/(\rho\text{m}\cdot\text{V}^{-1})$ |
|---------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|---|------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|---|
| MoS_2 | 133 | 34 | 3.69 | $\text{MoS}_2(\text{GB})$ | 116 | 34 | 4.49 |
| MoSe_2 | 104 | 25 | 5.09 | $\text{MoSe}_2(\text{GB})$ | 99 | 28 | 5.93 |
| MoTe_2 | 83 | 21 | 8.74 | $\text{MoTe}_2(\text{GB})$ | 74 | 22 | 11.17 |
| WS_2 | 146 | 30 | 2.19 | $\text{WS}_2(\text{GB})$ | 129 | 33 | 2.72 |
| WSe_2 | 119 | 20 | 2.73 | $\text{WSe}_2(\text{GB})$ | 107 | 26 | 3.36 |
| WTe_2 | 86 | 13 | 4.66 | $\text{WTe}_2(\text{GB})$ | 80 | 19 | 6.59 |
| $h\text{-BN}^{[8]}$ | 291 | 62 | 0.60 | $\alpha\text{-quartz}^{[8]}$ | | | 2.30 |

图3所示为36种含晶界单层TMDs和36种不含晶界单层TMDs的压电应变系数 d_{yy} 对比。结果表明,含晶界单层TMDs的 d_{yy} 值均大于其对应的不含晶界单层TMDs的 d_{yy} 值。其中,单层MoTe₂(GB)的 d_{yy} 最大,为11.17 pm/V,与单层MoTe₂(8.74 pm/V)相比增大了约27.80%,由此可见,晶界的存在可以有效地提高单层TMDs的压电系数。并且单层MoTe₂(GB)的压电系数是六方氮化硼(0.60 pm/V)的19倍,是 α -石英(2.30 pm/V)的5倍。另外, d_{yy} 的变化呈现相同的周期趋势,对于同一金属元素M,随着硫族元素X相对原子质量的增加 d_{yy} 值逐渐增大,即MTe₂>MSe₂>MS₂;对于同一硫族元素X,随着金属元素X相对原子质量的减小 d_{yy} 值逐渐增大,即MoX₂>WX₂。

为了阐明晶界对单层MX₂压电效应的影响机理,本文提出晶界的存在导致单层TMDs产生了面内的挠曲电效应。为了验证这一观点的正确性,以单层MoTe₂(GB)为例,如图4(a)所示,以Mo原

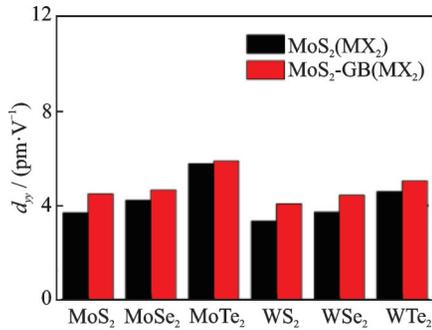
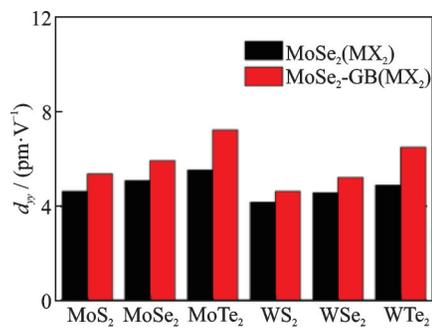
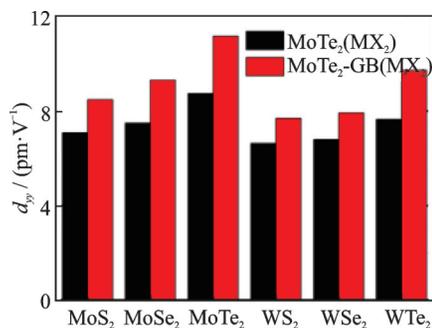
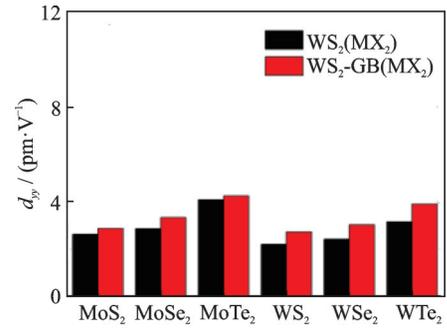
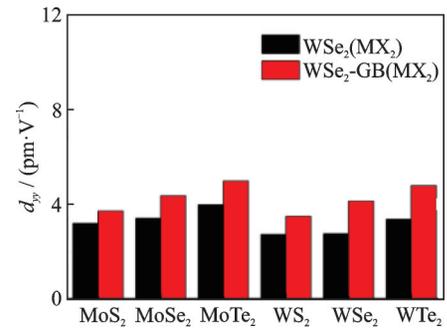
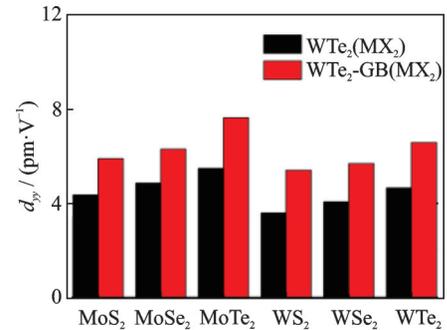
(a) MoS₂+NY₂ and MoS₂+NY₂(GB)(b) MoSe₂+NY₂ and MoSe₂+NY₂(GB)(c) MoTe₂+NY₂ and MoTe₂+NY₂(GB)(d) WS₂+NY₂ and WS₂+NY₂(GB)(e) WSe₂+NY₂ and WSe₂+NY₂(GB)(f) WTe₂+NY₂ and WTe₂+NY₂(GB)

图3 压电系数对比

Fig.3 Comparisons of piezoelectric coefficients of monolayer

子为中心,定义面内的应变梯度 $\Delta\epsilon$ 为

$$\Delta\epsilon = \frac{(l_{\text{Mo-Te}}^{\text{F}} - l_{\text{Mo-Te}}^{\text{B}})}{l_{\text{Mo-Te}}} \quad (5)$$

式中: $l_{\text{Mo-Te}}^{\text{F}} = (l_1^{\text{F}} + l_2^{\text{F}})/2$ 和 $l_{\text{Mo-Te}}^{\text{B}} = (l_3^{\text{B}} + l_4^{\text{B}} + l_5^{\text{B}} + l_6^{\text{B}})/4$

分别表示前面两个Mo-Te键长的平均值和后面4个Mo-Te键长的平均值(这里的前后是相对Mo原子), $l_{\text{Mo-Te}}$ 表示单层MoTe₂中Mo-Te键长平均值。

然后以每个原子为中心,原子的Wigner-Seitz半径为半径,通过公式 $D_y = \int \rho(r) r d^3r$ 定性估计每个原子的y向偶极矩,其中 $\rho(r)$ 为以Mo或Te原子为中心的Wigner-Seitz半径范围内的电荷密度, r 为Wigner-Seitz半径范围内任意一点到原子中心的距离。如图4(b)所示为单层MoTe₂(GB)分别在应变 ϵ_y 为0%、2.5%和5%时Mo原子的y向偶极矩 D_y 与应变梯度 $\Delta\epsilon$ 的变化关系。图4(b)中的红色

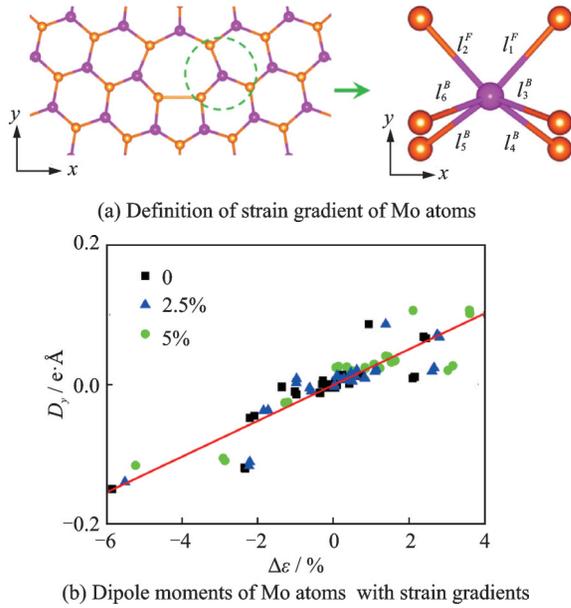


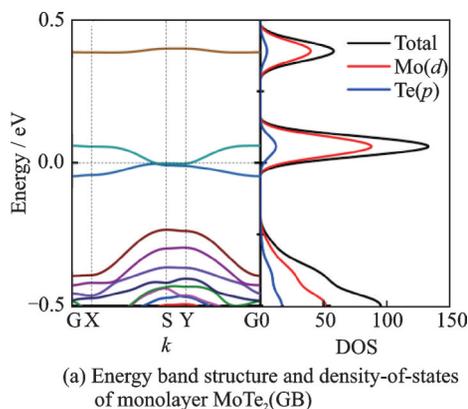
图 4 Mo 原子应变梯度的定义以及 Mo 原子偶极矩随应变梯度的变化关系

Fig.4 Definition of strain gradient of Mo atoms and dipole moments of Mo atoms with strain gradients

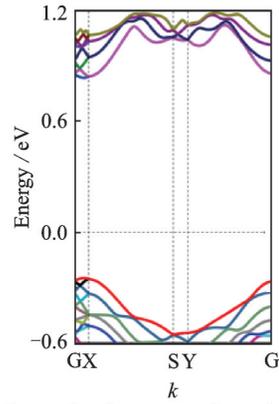
拟合曲线的方程为 $y=0.0257x-0.0013$, 结果表明, 在不同应变 ϵ_y 下, 所有 Mo 原子的 y 向偶极矩 D_y 随着应变梯度 $\Delta\epsilon$ 均近似呈线性变化, 且斜率近似相同, 证明前面定义的应变梯度是有效的, 体系中确实存在明显的挠曲电效应。

为了进一步分析由晶界导致的挠曲电效应对单层 TMDs 的影响, 计算了单层 $\text{MoTe}_2(\text{GB})$ 的能带结构和态密度并与单层 MoTe_2 的能带结构进行了对比, 如图 5 所示。结果表明, 晶界的存在会在费米能级附近引入若干局域态, 该局域态的电荷主要来源于 Mo 原子的 d 轨道。图 6 所示为单层 $\text{MoTe}_2(\text{GB})$ 和 MoTe_2 价带顶 (Valence band maximum, VBM) 以及导带底 (Conduction band maximum, CBM) 的电荷密度分布, 可以发现, 晶界导致的挠曲电效应会引起电荷产生明显的非均匀分布, 并在晶界位置发生聚集。

综上所述, 晶界的存在会导致单层 TMDs 中



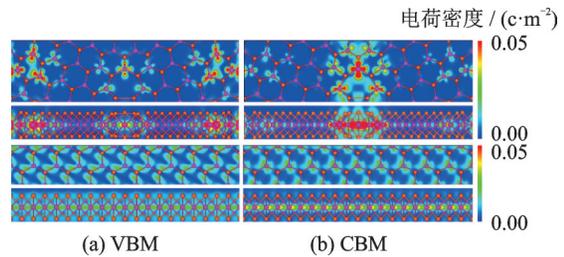
(a) Energy band structure and density-of-states of monolayer $\text{MoTe}_2(\text{GB})$



(b) Energy band structure of monolayer MoTe_2

图 5 单层 $\text{MoTe}_2(\text{GB})$ 和 MoTe_2 的能带结构

Fig.5 Energy band structure of monolayer $\text{MoTe}_2(\text{GB})$ and monolayer MoTe_2



(a) VBM (b) CBM

图 6 单层 $\text{MoTe}_2(\text{GB})$ 和 MoTe_2 价带顶和导带底的电荷密度分布

Fig.6 Charge density distribution of VBM and CBM of monolayer $\text{MoTe}_2(\text{GB})$ and MoTe_2

产生非均匀应变, 即存在应变梯度, 从而激发了面内的挠曲电效应, 这就是晶界增强单层 TMDs 压电效应的原因。

3 结 论

基于 DFT 理论, 本文计算了 36 种含晶界单层 TMDs 和 36 种不含晶界单层 TMDs 的压电系数并进行了对比, 结果表明晶界的存在会增强单层 TMDs 的压电效应, 其中, $\text{MoTe}_2(\text{GB})$ 的压电系数最大, 为 11.17 pm/V , 这是由于晶界的存在会使单层 TMDs 产生非均匀应变, 即存在应变梯度, 从而激发挠曲电效应导致的, 而且挠曲电效应会引起电荷产生非均匀分布, 使得大量的电荷聚集在晶界位置。除了晶界本身对单层 TMDs 压电效应具有重要影响, 探究晶界密度对单层 TMDs 压电效应的影响也具有重要意义, 可以在后续工作中开展进一步的研究。本文的研究结果为晶界增强单层 TMDs 的压电效应提供了新的视角。

参考文献:

[1] CRAWLEY E F. Intelligent structures for aerospace—A technology overview and assessment[J]. AIAA

- Journal, 1994, 32(8): 1689-1699.
- [2] CHOPRA I. Review of state of art of smart structures and integrated systems[J]. AIAA Journal, 2002, 40(11): 2145-2187.
- [3] GUEMES A, FERNANDEZ L A, GARCIA R J, et al. Simulation tools for a fiber-optic based structural health monitoring system[J]. Transactions of Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2018, 35(2): 219-225.
- [4] 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.
- [5] BUTLER S Z, HOLLEN S M, CAO L, et al. Progress, challenges, and opportunities in two-dimensional materials beyond graphene[J]. ACS Nano, 2013, 7(4): 2898-2926.
- [6] XU M, LIANG T, SHI M, et al. Graphene-like two-dimensional materials[J]. Chemical Reviews, 2013, 113(5): 3766-3798.
- [7] JOSWIG J O, LORENZ T, WENDUMU T B, et al. Optics, mechanics, and energetics of two-dimensional MoS₂ nanostructures from a theoretical perspective[J]. Accounts of Chemical Research, 2014, 48(1): 48-55.
- [8] DUERLOO K A N, ONG M T, REED E J. Intrinsic piezoelectricity in two-dimensional materials[J]. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2012, 3(19): 2871-2876.
- [9] LEE J H, PARK J Y, CHO E B, et al. Reliable piezoelectricity in bilayer WSe₂ for piezoelectric nanogenerators[J]. Advanced Materials, 2017, 29: 1606667.
- [10] BLONSKY M N, ZHUANG H L, SINGH A K, et al. Abinitio prediction of piezoelectricity in two-dimensional materials[J]. ACS Nano, 2015, 9(10): 9885-9891.
- [11] ZHOU Yongli, LIU Wei, HUANG Xin, et al. Theoretical study on two-dimensional MoS₂ piezoelectric nanogenerators[J]. Nano Research, 2016, 9(3): 800-807.
- [12] DONG L, LOU J, SHENOY V B. Large in-plane and vertical piezoelectricity in janus transition metal dichalcogenides[J]. ACS Nano, 2017, 11(8): 8242-8248.
- [13] WU Wenzhuo, WANG Lei, LI Yilei, et al. Piezoelectricity of single-atomic-layer MoS₂ for energy conversion and piezotronics[J]. Nature, 2014, 514(7523): 470-474.
- [14] DAI Mingjin, ZHENG Wei, ZHANG Xi, et al. Enhanced piezoelectric effect derived from grain boundary in MoS₂ monolayers[J]. Nano Letters, 2019, 20(1): 201-207.
- [15] ZHOU Wu, ZOU Xiaolong, NAJMAEI S, et al. Intrinsic structural defects in monolayer molybdenum disulfide[J]. Nano Letters, 2013, 13(6): 2615-2622.
- [16] CHENG Jingxin, JIANG Tao, JI Qingqing, et al. Kinetic nature of grain boundary formation in as-grown MoS₂ monolayers[J]. Advanced Materials, 2015, 27(27): 4069-4074.
- [17] ZHANG Zhuhua, ZOU Xiaolong, CRESPI V H, et al. Intrinsic magnetism of grain boundaries in two-dimensional metal dichalcogenides[J]. ACS Nano, 2013, 7(12): 10475-10481.
- [18] HUANG Yuli, CHEN Yifeng, ZHANG Wenjing, et al. Bandgap tunability at single-layer molybdenum disulfide grain boundaries[J]. Nature Communications, 2015, 6: 6298.
- [19] TAGANTSEV A K. Piezoelectricity and flexoelectricity in crystalline dielectrics [J]. Physical Review B, 1986, 34(8): 5883-5889.
- [20] BLOCH P E. Projector augmented-wave method [J]. Physical Review B Condensed Matter, 1994, 50(24): 17953-17979.
- [21] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple[J]. Physical Review Letters, 1996, 77(18): 3865-3868.
- [22] KING-SMITH R D, VANDERBILT D. Theory of polarization of crystalline solids[J]. Physical Review B, 1993, 47(3): 1651-1654.

(编辑:陈璐)