

文章编号: 2096-1618(2022)06-0721-06

# 热电材料 SnX (X = S, Se, Te) 的电子结构和弹性性质的第一性原理研究

尹国庆, 虞游, 沈艳红, 王枋悦, 马颖, 李叶古  
(成都信息工程大学光电工程学院, 四川 成都 610225)

**摘要:**采用基于密度泛函理论的第一性原理方法研究了热电材料 SnX (X = S, Se, Te) 的单层和块体结构的电子性质,并对块体结构 SnX 的弹性性质进行计算和分析,计算结果与文献中理论和实验结果相符。通过对能带和态密度的计算,发现单层和块体结构的 SnX 均为间接带隙半导体,带隙均随着 X 原子序数的增大而减小。根据计算得到的块体结构的弹性常数  $C_{ij}$ 、体弹模量  $B$  和剪切模量  $G$  等值,发现 SnX 是力学稳定的,且它们都表现出脆性,并由弹性各向异性因子得到 SnX 具有弹性各向异性。

**关键词:**第一性原理;热电材料;单层结构;电子性质;弹性

**中图分类号:** O472+.91

**文献标志码:** A

**doi:** 10.16836/j.cnki.jcui.2022.06.016

## 0 引言

由于化石燃料滥用导致能源枯竭的问题日益严重,科学家迫切需要找到解决这一问题的办法,其中热电材料作为一种利用固体内部载流子运动实现热能和电能直接转换的材料,可以广泛应用于地热发电、光热发电等清洁能源发电,因此受到科学界的广泛关注。目前对热电材料的研究主要集中在 IV-VI 族元素半导体,为得到更好的热电性能,现有的方法主要集中在两个方面:一是对这类材料的掺杂<sup>[1-2]</sup>,如对 P 型 PbTe 掺杂后在温度 770 K 时其 ZT 值可以达到 1.8<sup>[3]</sup>,在 840 K 时对 SnTe 进行掺杂,其 ZT 值可达 1.5<sup>[4]</sup>;二是对热电材料的单层结构进行研究,石墨烯单层结构的发现与合成<sup>[5-6]</sup>为其他二维材料的发展铺平了道路,文献[7-8]证实了实现更多单层材料的可能性。本文采用基于密度泛函理论<sup>[9]</sup>的第一性原理方法对热电材料 SnX (X=S, Se, Te) 进行研究,这类半导体在不同压强不同温度下会呈现出不同的晶体结构,主要是立方的 NaCl 结构和黑磷单层结构(Pnma 相)<sup>[10]</sup>,本文主要研究的是这类化合物的 Pnma 相和其对应的单层结构的电子性质和弹性性质,为后续对它们热电性质的研究以及通过掺杂实现对不同材料热电性能的提升提供理论支持。

## 1 计算方法

本文所有的计算均通过 Material Studio 软件里的 CASTEP 模块完成,基于密度泛函理论框架下的第一性

原理方法进行。对结构优化、电子性质和弹性性质的计算均使用超软赝势(ultrasoft pseudopotential)来描述电子与原子核之间的相互作用,用于扩展电子波函数的平面截止波能量设置为 400 eV。块体结构在结构弛豫中所用的 K 点均为  $4 \times 8 \times 8$ ,单层则均为  $8 \times 1 \times 8$ 。在结构优化和电子性质的计算中,本文采用广义梯度近似(GGA)<sup>[11]</sup>中的 PBE(perdew-burke-ernzerhof)<sup>[12]</sup>作为交换关联泛函。对于单层结构模型,采用沿三维方向的周期边界条件,在垂直于层方向上构建真空层。更大真空间距可以减少层与层之间的相互作用所带来的影响,但也会增大计算量,为兼顾这两个因素以及结构精确度,采用了厚度为 10 Å 的真空层。

## 2 结果与讨论

### 2.1 结构优化

SnX 存在多种结构,以 SnTe 为例,其常温常压下为类 NaCl 的面心立方结构,在压力为 1.9 GPa 为 Fm3m 相,在 13.3 GPa 为 Pnma、Cmcm 相共存,在 31.3 GPa 为 Pm3m 相<sup>[13]</sup>。本文对 SnX 块状结构的计算均采用  $\alpha$  相(Pnma 相),其结构如图 1 所示。从图 1(a)可以看出,每个原胞包含 4 个 Sn 原子和 4 个 X 原子。在块体结构的基础上构建真空层,得到 SnX 的单层结构(如图 2 所示)。经过弛豫后的单层结构属于 Pmn21 空间群,这和 Li 等<sup>[14]</sup>的计算结果一致。单层结构的布里渊区和 K 点走向均在 2D 平面内,所以块体结构和单层结构的布里渊区和 K 点走向是不一样的,如图 1(c)和图 2(c)所示。

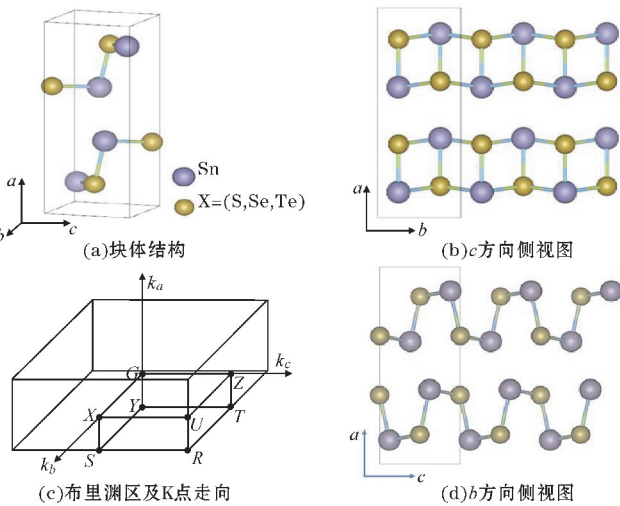


图 1 SnX 块体结构

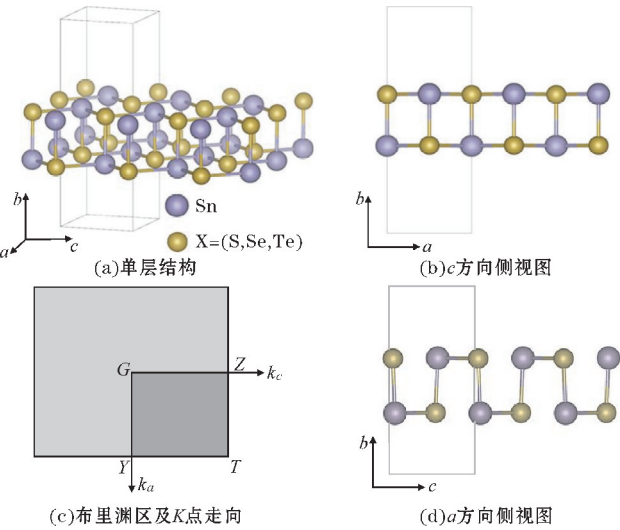


图 2 SnX 单层结构

经过结构弛豫得到的晶格常数如表 1 所示,计算值比实验值偏大,这与 GGA 近似的标准相一致。块体结构优化所得晶格常数与实验值的误差范围为0.93%~3.32%,由于优化的是理想晶体,没有考虑零点运动和热效应,所以与实验值存在一定的误差。单层结构优化所得晶格常数与其他计算值的误差均在 1% 以内。电子性质和弹性性质的计算均采用优化出的晶格参数。

表 1 结构优化后 SnX 的单层结构和块体结构的晶格常数

	Monolayer		Bulk		
	<i>a</i> (Å)	<i>c</i> (Å)	<i>a</i> (Å)	<i>b</i> (Å)	<i>c</i> (Å)
SnS	4.09	4.28	11.46	4.07	4.29
Exp. <sup>[15]</sup>	—	—	11.20	3.99	4.33
Cal. <sup>[16–17]</sup>	4.08	4.27	11.37	4.02	4.35
SnSe	4.26	4.39	11.68	4.17	4.45
Exp. <sup>[15]</sup>	—	—	11.50	4.15	4.44
Cal. <sup>[18–19]</sup>	4.29	4.39	11.77	4.22	4.53
SnTe	4.57	4.57	12.29	4.51	4.70
Exp. <sup>[20]</sup>	—	—	12.10	4.36	4.57
Cal. <sup>[2]</sup>	4.56	4.57	—	—	—

2.2 电子性质

从图 3 可以看到单层结构的带隙宽度普遍高于其对应的块体结构,这是由于单层材料中的量子限制造成跨层间区域的 *p* 轨道相互作用<sup>[21]</sup>。其次,随着 VI 族元素原子序数的增加,其单层和块体结构的带隙随之变窄。从表 2 可以看出,计算得到的块体 SnTe 的带隙仅为 0.124 eV,有很高的电导率。从表 2 可以看出

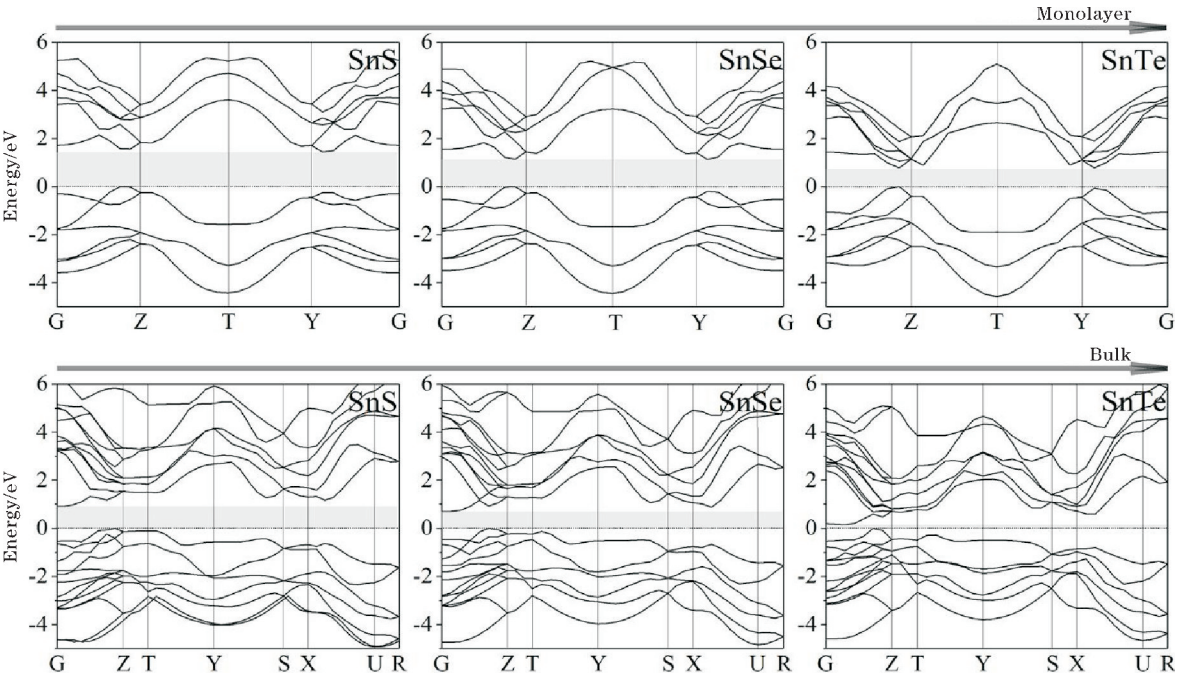


图 3 SnX 单层结构和块体结构的能带图

SnX 的单层和块体的能带结构的导带底 (conduction band minimum, CBM) 和价带顶 (valence band maximum, VBM) 对应的  $K$  点位置不同,这说明它们均是间接带隙半导体。处于平衡状态的单层 SnX 的 CBM 和 VBM 分别在  $G$ - $Y$  和  $G$ - $Z$  路径上,通过计算得到 3 种单层材料最小间接带隙分别为 1.444 eV, 1.134 eV 和 0.779 eV,最小的直接带隙分别为 1.583 eV, 1.143 eV 和 0.783 eV,且最小直接带隙和间接带隙差值很小,这

将进一步增强它们的电导率,计算结果与文献 [22–23] 的结果一致。对于块体结构,SnX 的导带底和价带顶都在  $G$ - $Z$  路径上,其位置与 He 等<sup>[24]</sup> 的计算结果相近,间接带隙也随着  $X$  原子序数的增加而减小,这种趋势是由原子轨道离域化的增加,导致金属原子与  $X$  原子之间的相互作用减弱而造成的。对于原子序数较小的硫族化合物 SnX,更强的  $s$ - $p$  杂化增加了成键态和反键态之间的分裂,从而增大了带隙<sup>[25]</sup>。

表 2 SnX 单层和块体结构的带隙值和他人的实验值或理论值,导带底 (CBM) 和价带顶 (VBM) 沿布里渊区  $G$ - $Y$  和  $G$ - $Z$  方向的对应位置, $k_a$ ,  $k_b$  和  $k_c$  方向的值分别以  $2\pi/|a|$ ,  $2\pi/|b|$  和  $2\pi/|c|$  为单位

	Monolayer				Bulk					
	Energy gap/eV		VBM	CBM	Energy gap/eV			VBM	CBM	
	This work	Cal.			This work	Exp.	Cal.			
SnS	1.444	1.46 <sup>[26]</sup>	(0.37, 0)	(0, 0.45)	0.905	1.049 <sup>[27]</sup>	–	(0, 0, 0.44)	(0, 0, 0)	
SnSe	1.134	1.00 <sup>[26]</sup>	(0.43, 0)	(0, 0.44)	0.702	0.898 <sup>[27]</sup>	–	(0, 0, 0.36)	(0, 0, 0)	
SnTe	0.779	0.81 <sup>[14]</sup>	(0.43, 0)	(0, 0.43)	0.124	–	0.30 <sup>[28]</sup>	(0, 0, 0.35)	(0, 0, 0.14)	

图 4 为 SnX 的单层和块体结构的总态密度和分态密度图。由于其他轨道的贡献很低,所以只展示了 Sn 原子和  $X$  原子的  $s$  轨道和  $p$  轨道。从图 4 可以看出,SnX 单层和块体结构的导带和价带分布是相近的,为方便描述,在费米能级附近的价带用 VBM1 表示,费米能级附近的导带用 CBM 表示,在  $-6$  eV 附近的价带用 VBM2 表示,在  $-12$  eV 附近的价带区域用 VBM3 表示。VBM1 主要由  $X$

原子的  $p$  轨道和少量 Sn 原子的  $s$  和  $p$  轨道贡献,CBM 主要由 Sn 原子的  $p$  轨道和少量  $X$  原子的  $p$  轨道贡献,这说明 SnX 是具有共价性的离子晶体。VBM2 主要由 Sn 原子的  $s$  轨道和  $X$  原子的  $p$  轨道贡献,其中前者占多数贡献。VBM3 主要由  $X$  原子的  $s$  轨道电子贡献,但该价带处于电子的深能级轨道,对费米能级和材料的电运输性影响较小。上述结论和文献 [22, 24] 结果一致。

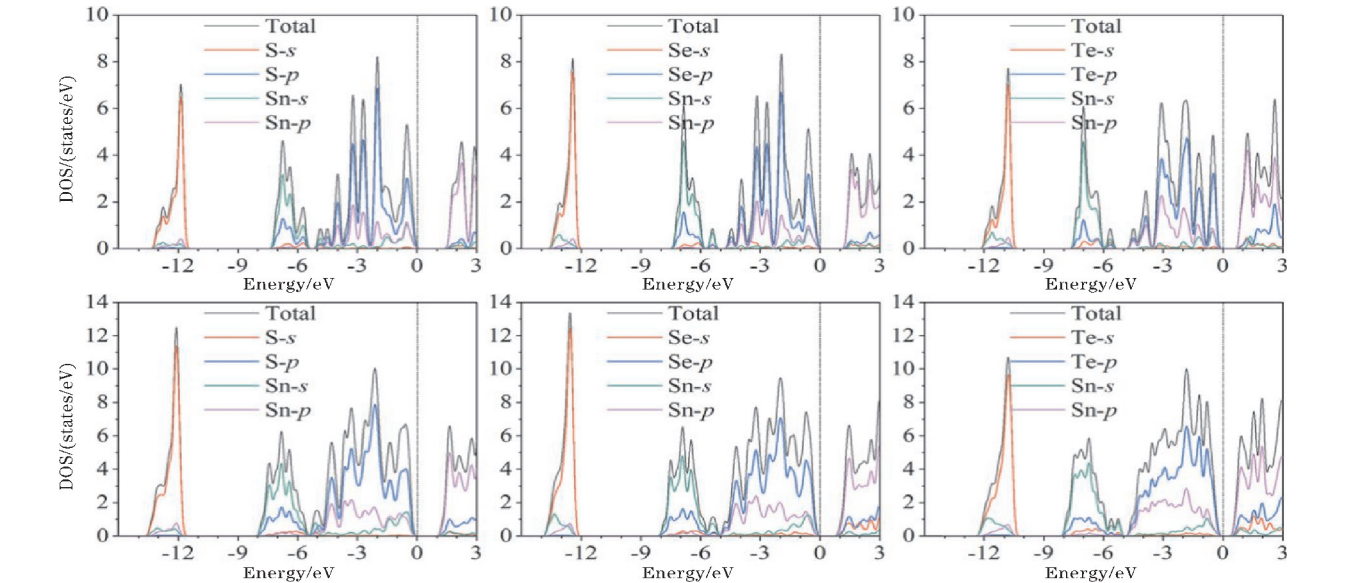


图 4 SnX 的单层结构和块体结构的总态密度和分态密度图

2.3 弹性性质

弹性是对材料施加应力或应变场时反应的量度,经常确定晶格振动的特性、热传输机制和晶体中的结构部署。由于 3 种物质均为正交结构,Pnma 相有 9 个独立的弹性常数<sup>[29]</sup>,其弹性张量可由式(1)表示,式中  $C_{ij}$  的计算值见表 3。

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} \quad (1)$$



表 3 SnX 块体结构的弹性模量值以及他人的理论值

Materials	$C_{11}$	$C_{22}$	$C_{33}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{23}$	$C_{44}$	$C_{55}$	$C_{66}$
SnS	92.3	81.5	69.4	23.5	25.1	38.9	44.9	24.1	24.9
Cal. [24]	83.9	99.3	52.4	51.4	27.9	28.4	24.4	29.5	42.7
SnSe	86.6	74.4	67.8	15.0	19.2	41.9	46.2	21.0	21.4
Cal. [24]	84.5	88.7	52.0	19.3	22.4	23.7	49.5	22.6	19.3
SnTe	69.7	62.1	23.4	8.2	13.2	24.9	33.1	18.1	15.0

根据波恩稳定性判据<sup>[30]</sup>,正交晶系的限制为

$$C_{11}>0C_{11}C_{22}>C_{12}^2$$
$$C_{11}C_{22}C_{33}+2C_{12}C_{13}C_{23}-C_{11}C_{23}^2-C_{22}C_{13}^2-C_{33}C_{12}^2>0$$
$$C_{44}>0C_{55}>0C_{66}>0 \tag{2}$$

从表 3 给出的值可知,计算出的弹性常数满足上述限制条件,意味着在基态情况下,SnX 块体结构是稳定的。

为研究这 3 种材料的弹性各向异性,采用 Voigt-Reuss-Hill (VRH) 近似将各向异性弹性常数转换为宏观弹性模量,宏观弹性模量代表晶体材料的平均(有效)弹性<sup>[31]</sup>。根据 Voigt<sup>[32]</sup> 假设,将体弹模量  $B_V$  和剪切模量  $G_V$  可分别表示为

$$B_V=\frac{C_{11}+C_{22}+C_{33}+2C_{12}+2C_{13}+2C_{23}}{9} \tag{3}$$

$$G_V=\frac{C_{11}+C_{22}+C_{33}-C_{12}-C_{13}-C_{23}+3C_{44}+3C_{55}+3C_{66}}{15} \tag{4}$$

根据 Reuss<sup>[33]</sup> 近似,体弹模量  $B_R$  和剪切模量  $G_R$  可以表示为

$$B_R=\frac{1}{S_{11}+S_{22}+S_{33}+2S_{12}+2S_{13}+2S_{23}} \tag{5}$$

$$G_R=\frac{15}{4(S_{11}+S_{11}+S_{11})-4(S_{12}+S_{13}+S_{23})+3(S_{44}+S_{55}+S_{66})} \tag{6}$$

式中, $[S_{ij}]=[C_{ij}]^{-1}$ , $S_{ij}$ 为弹性柔顺常数。弹性模量可以用 Hill<sup>[34]</sup> 的平均值来近似,因此体弹模量  $B$ 、剪切模量  $G$  和杨氏模量  $E$  可以表示为

$$B=\frac{B_V+B_R}{2} \quad G=\frac{G_V+G_R}{2} \quad E=\frac{9BG}{3B+G} \tag{7}$$

材料的弹性特性通常是由体弹模量、剪切模量、杨氏模量和泊松比表征。随着 X 原子序数增大, $B$  表现出明显的下降趋势,表明 SnX 的外部体积变形抵抗力降低。 $E$  可以表征材料的刚度,其值越大刚度越大,所以从表 4 中的数据可知,随着 X 原子序数增大,材料刚度降低。 $B/G$  的值与材料的延展性和脆性相联系<sup>[35]</sup>, $B/G>1.75$ 则属于延展性材料,否则属于脆性材料。泊松比  $\nu$  也是判断材料延展性和脆性的参数,Frantsevich 等<sup>[36]</sup> 研究表明, $\nu>1/3$ 时材料表现为延展性,反之表现为脆性。由表 4 中数据可知,块体结构

SnX 的  $B/G$  均小于 1.75, $\nu$  均小于 1/3,都属于脆性材料,这和 He 等<sup>[24]</sup> 的计算结果一致,且脆性随着 X 原子系数的增大而增强。

表 4 SnX 的体弹模量、剪切模量、弹性模量、泊松比和  $B/G$

	$B$	$G$	$E$	$\nu$	$B/G$
SnS	46.4	27.8	69.5	0.25	1.67
Cal. [24]	46.1	27.6	69.1	0.25	1.67
SnSe	42.3	25.7	64.1	0.25	1.64
Cal. [24]	38.7	29.0	65.7	0.22	1.43
SnTe	24.7	16.9	41.2	0.22	1.46

从本质上讲,材料的各向异性说明沿不同方向原子排布是不一样的,因此在工程科学和晶体物理学中对晶体各向异性的描述十分重要。为了量化 SnS、SnSe 和 SnTe 中弹性的各向异性,采用各向异性因子来描述不同平面原子间键合各向异性程度。 $\{100\}$ 、 $\{010\}$  和  $\{001\}$  面的各向异性因子分别为  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$ , 三者的各向异性表达式<sup>[37]</sup> 为

$$A_1=\frac{4C_{44}}{(C_{11}+C_{33}-2C_{13})}$$
$$A_2=\frac{4C_{55}}{(C_{22}+C_{33}-2C_{23})}$$
$$A_3=\frac{4C_{66}}{(C_{11}+C_{22}-2C_{12})} \tag{8}$$

对于各向同性的晶体,因子  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$  必须为 1,而任何小于或者大于 1 的值均表现出弹性各向异性。SnX 的各向异性因子  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$  的值如图 5 所示,3 种材料的  $A_1$  和  $A_2$  都大于 1,而  $A_3$  均小于 1,可知这 3 种材料的块体结构的各个面均呈现弹性各向异性,且 SnX 的  $\{100\}$  面的各向异性程度最大。

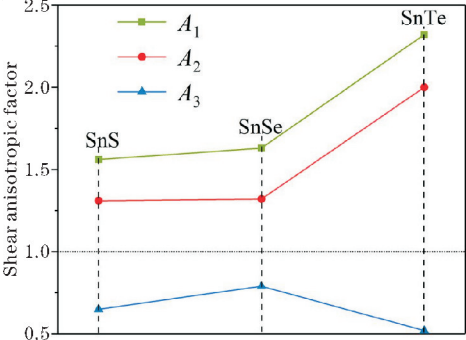


图 5 SnS, SnSe 和 SnTe 的各向异性因子

### 3 结论

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理方法计算并分析了 SnX (X=S, Se, Te)块体和单层结构的电子性质和弹性性质。从计算的能带结构和态密度结果可知,这3种材料的单层和块体结构均为间接带隙,带隙均随着X原子序数的增大而减小,且单层结构的最小直接带隙和间接带隙差值很小,这将进一步增强它们的电导率。从态密度的计算结果可知,SnX是具有共价性的离子晶体。通过SnX块体结构的弹性性质的计算结果,得到3种材料都满足热力学稳定性条件,且随着X原子序数的增大,SnX的外部体积变形抵抗力和刚度均随之降低。从计算出的 $B/G$ 和 $\nu$ 的值可知,3种材料均表现为脆性。SnX的电子性质和弹性性质的计算结果与文献均一致,这对SnX单层结构的热电性能以及掺杂后的热电性质的研究有着指导意义。

### 参考文献:

- [1] Zhou T, Du JY, Wang C, et al. Chemical doping of the SnSe monolayer: a first-principle calculation [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2019, 21(27): 14629–14637.
- [2] Guo H, Jiang WT, She Q Q, et al. SnTe monolayer: Tuning its electronic properties with doping[J]. *Superlattices and Microstructures*, 2019, 130: 12–19.
- [3] Pei Y Z, Shi X Y, Lalonde A, et al. Convergence of electronic bands for high performance bulk thermoelectrics[J]. *Nature*, 2011, 473(7345): 66–69.
- [4] Bhat D K, Sandhya S U. High thermoelectric performance of co-doped tin telluride due to synergistic effect of magnesium and indium [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2017, 121(13): 7123–7130.
- [5] Zhou J, Wang Q, Sun Q, et al. Ferromagnetism in semihydrogenated graphene sheet[J]. *Nano Letters* 2009, 9(11): 3867–3870.
- [6] 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.
- [7] Novoselov K S, Fal'ko V I, Colombo L, et al. A roadmap for graphene [J]. *Nature*, 2012, 490(7419): 192–200.
- [8] Zhuang H L, Hennig R G. Single-layer group-III monochalcogenide photocatalysts for water splitting[J]. *Chemistry of Materials*, 2013, 25(15): 3232–3238.
- [9] Parr R G. Density functional theory[J]. *Annual Review of Physical Chemistry*, 1983, 34(1): 631–656.
- [10] Wang X M, Jones A M, Seyler K L, et al. Highly anisotropic and robust excitons in monolayer black phosphorus [J]. *Nature Nanotechnology*, 2015, 10(6): 517–521.
- [11] Perdew J P, Yue W. Pair-distribution function and its coupling-constant average for the spin-polarized electron gas [J]. *Physical Review B*, 1992, 46(20): 12947–12954.
- [12] 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.
- [13] Zhou D, Li Q, Ma YM. Unraveling convoluted structural transitions in SnTe at high pressure [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2013, 117(10): 5352–5357.
- [14] Li Y, Wu M N, Ding T, et al. Promising thermoelectric properties and anisotropic electrical and thermal transport of monolayer SnTe [J]. *Applied Physics Letters*, 2019, 114(8): 083901(1–5).
- [15] Wiedemeier H, Georg H, Schnering G V. Refinement of the structures of GeS, GeSe, SnS and SnSe [J]. *Zeitschrift für Kristallographie - New Crystal Structures*, 1978, 148(3–4): 295–303.
- [16] Guo S D, Wang Y H. Thermoelectric properties of orthorhombic group IV–VI monolayers from the first-principles calculations [J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 121(3): 034302(1–7).
- [17] Gomes L C, Carvalho A. Phosphorene analogues: Isoelectronic two-dimensional group-IV monochalcogenides with orthorhombic structure [J]. *Physical Review B: covering condensed matter and materials physics*, 2015, 92(8): 085406(1–8).
- [18] Xu L, Yang M, Wang S J, et al. Electronic and optical properties of the monolayer group-IV monochalcogenides MX (M = Ge, Sn; X = S, Se, Te) [J]. *Physical review B*, 2017, 95(23): 235434(1–9).
- [19] Li G D, Aydemir U, Wood M, et al. Ideal strength and deformation mechanism in high-efficiency thermoelectric SnSe [J]. *Chemistry of Materials*, 2017, 29(5): 2382–2389.
- [20] Eisenmann B, Schäfer H. SeTm–TeU [M]. *Germany: Springer-Verlag*, 1986: 406–419.
- [21] Singh A K, Hennig R G. Computational prediction of two-dimensional group-IV mono-chalcogenides [J]. *Applied Physics Letters*, 2014, 105(4): 042103(1–4).

- [22] Liu C M, Xu C, Duan M Y. Structural, thermodynamic, elastic, and electronic properties of  $\alpha$ -SnS at high pressure from first-principles investigations[J]. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 2015, 70(11):949–960.
- [23] Wan W h, Liu C, Xiao W D, et al. Promising ferroelectricity in 2D group IV tellurides: a first-principles study [J]. *Applied Physics Letters*, 2017, 111(13):132904(1–5).
- [24] He X C, Shen H L, Wang W. The mechanical and thermo-physical properties and electronic structures of SnS and SnSe in orthorhombic structure [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2013, 556:86–93.
- [25] Littlewood P B. The crystal structure of IV-VI compounds. I. Classification and description [J]. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1980, 13(26):4855–4873.
- [26] Huang L, Wu F G, Li J B. Structural anisotropy results in strain-tunable electronic and optical properties in monolayer GeX and SnX (X=S, Se, Te) [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2016, 144(11):114708(1–7).
- [27] Parenteau M, Carlone C. Influence of temperature and pressure on the electronic transitions in SnS and SnSe semiconductors [J]. *Physical Review B*, 1990, 41(8):5227–5234.
- [28] Zhou D, Li Q, Ma Y M, et al. Pressure-induced superconductivity in SnTe: a first-principles study [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2013, 117(23):12266–12271.
- [29] Gladden J R, Li G, Adebisi R, et al. High-temperature elastic moduli of bulk nanostructured n- and p-type silicon germanium [J]. *Physical Review B*, 2010, 82(4):2101–2112.
- [30] Mouhat F, Coudert F X. Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems [J]. *Physical Review B*, 2014, 90(22):224104(1–4).
- [31] Ravindran P, Fast L, Kozhavyi P A, et al. Density Functional Theory for Calculation of Elastic Properties of Orthorhombic Crystals: Application to TiSi<sub>2</sub> [J]. *Journal of Applied Physics*, 1998, 84(9):4891–4904.
- [32] Voigt W. *Lehrbuch der kristallphysik: (mit Ausschluss der Kristalloptik)* [M]. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, 1928:560–800.
- [33] Reuss A. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle [J]. *ZAMM - Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 1929, 9(1):49–58.
- [34] Hill R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate [J]. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 1952, 65(5):349–354.
- [35] Pugh S F. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals [J]. *Philosophical Magazine*, 1954, 45(367):823–843.
- [36] Frantsevich I N, Voronov F F, Bokuta S A. *Elastic Constants and Elastic Moduli of Metals and Insulators Handbook* [M]. Naukova Dumka: Kiev, Ukraine, 1983:60–180.
- [37] Ravindran P, Fast L, Kozhavyi P A, et al. Density functional theory for calculation of elastic properties of orthorhombic crystals: Application to TiSi<sub>2</sub> [J]. *Journal of Applied Physics*, 1998, 84(9):4891–4904.

## First-principles Study of Electronic and Elastic Properties of SnX (X=S, Se, Te)

YIN Guoqing, YU You, SHEN Yanjiang, WANG Liye, MA Ying, LI Yegu

(College of Optoelectronic Engineering, Chengdu University of Information Technology, Chengdu 610225, China)

**Abstract:** First-principles methods based on density functional theory are used to research the electronic properties of the monolayer and bulk structures of the thermoelectric material SnX (X=S, Se, Te), and the elastic properties of the bulk structure SnX are calculated and analyzed. The calculated results are consistent with the reported theoretical or experimental results. Through the calculation of energy band and density of states, it is found that SnX with monolayer and bulk structure are indirect band gap semiconductors, and the band gap decreases with the increase of the atomic number of X. According to the calculated values of elastic constant  $C_{ij}$ , bulk elastic modulus  $B$  and shear modulus  $G$  of the bulk structure, it is found that SnX is mechanically stable, and they all exhibit brittleness. The elastic anisotropy factor shows that SnX has elastic anisotropy.

**Keywords:** first principles; thermoelectric materials; monolayer structure; electronic properties; elasticity