

# Calculation of Band Structure, Dielectric Function and Electron Energy Loss Spectrum of Bilayer h-BN under Biaxial Strain

Somayeh Behzad\*

Department of Engineering Physics, Kermanshah University of Technology, Kermanshah, Iran

Received: 12.10.2018    Final revised: 26.10.2019    Accepted: 28.12.2019

DOI: 10.22055/jrmbms.2020.15330

## Abstract

Using density functional theory, this study investigated the electronic and optical properties of bilayer h-BN under in-plane biaxial strain. The total energy calculations show that the AB stacking configuration is more stable than AA stacking configuration. Besides, the strain-free bilayer h-BN has an indirect band gap of 4/33 eV along the K–M direction. By applying the compressive strain, the conduction band minimum at the M point moves upward, while the conduction band edge at the  $\Gamma$  point moves downward. The optical spectra of bilayer h-BN, including the dielectric function and electron energy loss spectrum, move to lower (higher) energies under tensile (compressive) strain.

**Keywords:** Bilayer hexagonal boron nitride, Density functional theory, Dielectric function, Electron energy loss spectrum, Refraction index

\*Corresponding Author: [somayeh.behzad@gmail.com](mailto:somayeh.behzad@gmail.com)



## محاسبه ساختار نواری، تابع دی‌الکتریک و طیف اتلاف انرژی هگزاگونال بورون نیتريد دو لایه تحت کرنش صفحه‌ای دو محوری

سمیه بهزاد\*

گروه فیزیک مهندسی، دانشگاه صنعتی کرمانشاه، کرمانشاه، ایران

دریافت: 1397/07/20 ویرایش نهائی: 1398/08/04 پذیرش: 1398/10/07

DOI: 10.22055/jrmb.2020.15330

### چکیده

در این مطالعه، با استفاده از نظریه تابعی چگالی خواص الکتریکی و اپتیکی هگزاگونال بورون نیتريد (h-BN) دو لایه تحت کرنش صفحه‌ای دو محوری بررسی می‌شوند. محاسبه انرژی کل دو حالت برهم‌چینش AA و AB نشان می‌دهد که حالت AB پایدارتر از حالت AA است. h-BN دو لایه دارای گاف نواری غیر مستقیم به اندازه 4/33 eV در راستای K-M است. با اعمال کرنش تراکمی، کمینه نوار رسانش در نقطه M نسبت به تراز فرمی به سمت بالا و لبه نوار رسانش در نقطه  $\Gamma$  به سمت پایین جابه‌جا می‌شود. به‌ازای 6% - کرنش تراکمی گاف نواری به گاف نواری غیر مستقیم در راستای K- $\Gamma$  تبدیل می‌شود. با اعمال کرنش کششی، کمینه نوار رسانش در نقاط K و M نسبت به تراز فرمی به سمت پایین جابه‌جا می‌شود و گاف نواری کاهش می‌یابد. توابع اپتیکی h-BN دو لایه، شامل تابع دی‌الکتریک، طیف اتلاف انرژی و ضریب شکست، تحت کرنش کششی (تراکمی) به سمت انرژی‌های کمتر (بیشتر) جابه‌جا می‌شوند. محاسبات نشان می‌دهند که با اعمال کرنش می‌توان خواص الکتریکی و اپتیکی h-BN دو لایه را تغییر داد که این نتایج می‌تواند در طراحی نیم‌رساناهای جدید مورد استفاده قرار گیرد.

**کلیدواژگان:** هگزاگونال بورون نیتريد دو لایه، نظریه تابعی چگالی، خواص الکتریکی، تابع دی‌الکتریک، طیف اتلاف انرژی، ضریب شکست

### مقدمه

از خود نشان می‌دهند [1 و 2]. این خواص گرافن را به یک کاندید بسیار مناسب برای استفاده در قطعات فوتونیک و الکترونیک مانند ترانزیستورهای اثر میدانی تبدیل کرده است. گرافن یک نیم‌رسانا با گاف صفر است. برای استفاده از گرافن در صنعت الکترونیک نیاز به ایجاد گاف انرژی در نوار انرژی آن است، زیرا گاف انرژی برای کنترل خواص الکتریکی در قطعات الکترونیک بسیار ضروری است. روش‌های مختلفی

گرافن ماده‌ای تک‌لایه از اتم‌های کربن در یک شبکه شش‌گوشی دوبعدی است که در سال‌های اخیر توجه زیادی را در حوزه علوم و فناوری نانو به خود جلب کرده است. گرافن دارای خواص فیزیکی منحصر به‌فردی است، حامل‌های بار در آن مانند فرمیون‌های دیراک بدون جرم رفتار می‌کنند و تحرک‌پذیری بالایی

\* نویسنده مسئول: somayeh.behzad@gmail.com



### روش انجام محاسبات و شبیه سازی

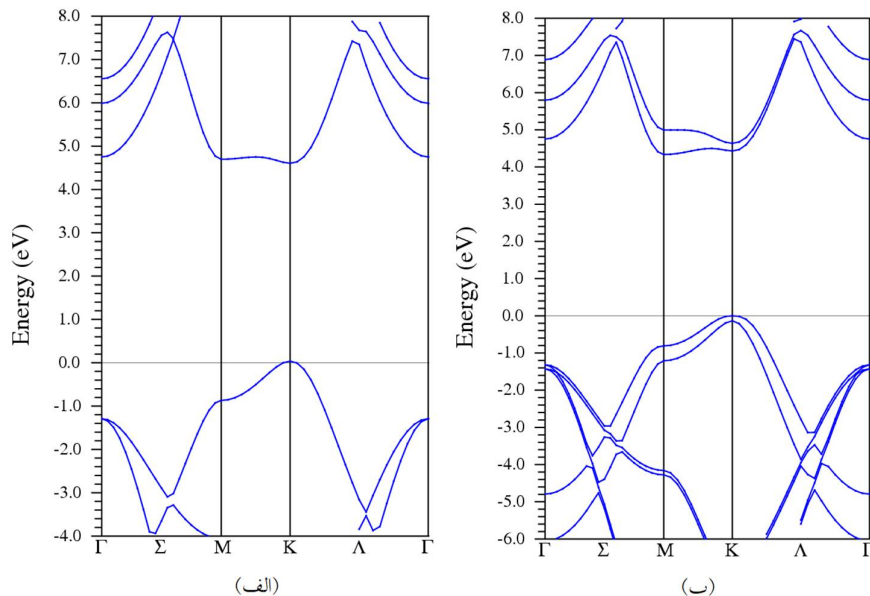
محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل، بر پایه نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزار WIEN2K انجام شده است [21]. برای محاسبه انرژی تبادل-همبستگی از تقریب چگالی موضعی LDA استفاده شده است [22]. پارامتر  $RK_{max}$  که اندازه مجموعه پایه را در محاسبات کنترل می کند برابر 7 و تعداد نقاط K برای محاسبه ساختار نواری در منطقه اول بریلوئن برابر 1500 است. شعاع مافین تین تمها با توجه به شعاع کره اتمی و طول پیوندها انتخاب شده اند. بردار موج قطع برای بسط فوریه چگالی بار،  $G_{max}=12$  اختیار شده است. مقدار انرژی جداسازی حالت های ظرفیت از حالت های مغزه را 6- ریدبرگ در نظر گرفته ایم. در اجرای برنامه معیار همگرایی انرژی از مرتبه 0,0001 را در نظر گرفتیم. آرایش الکترونی اتم بورون و نیتروژن به صورت  $1s^2 2s^2 2p^1$  و  $1s^2 2s^2 2p^3$  می باشد. برای اتم بورون الکترون های تراز 1s الکترون های مغزی و الکترون های تراز 2s و 2p الکترون های ظرفیت هستند و برای اتم نیتروژن الکترون های تراز 1s الکترون های مغزی و الکترون های تراز 2s الکترون های شبه مغزی و الکترون های تراز 2p الکترون های ظرفیت هستند. برای شبیه سازی h-BN دو لایه از یک سلول یکه شش گوشه استفاده می کنیم. برای حذف برهم کنش بین لایه ای، فاصله عمودی بین دو صفحه h-BN مجاور در دو سلول یکه  $20\text{\AA}$  در نظر گرفته شده است. سلول یکه نانو صفحه های BN شامل 2 اتم بورون و 2 اتم کربن می باشد. بهینه سازی مکان تمها در سلول یکه و اندازه بردار شبکه به وسیله روش PORT و با استفاده از نرم افزار WIEN2K انجام می شود، تا جایی که نیروهای وارد بر هر اتم کمتر از  $0,02\text{ eV/\AA}$  شود.

برای ایجاد گاف در گرافن وجود دارد مانند اعمال میدان الکتریکی و کرنش تک محوری، اضافه کردن ناخالصی های شیمیایی یا تغییر ساختار گرافن [7-3]. هگزاگونال بورون نیتريد (h-BN) یک ساختار شش گوشه دویعدی است که مانند گرافن خواص قابل توجهی از خود نشان می دهد [8]. خواص مناسب h-BN مانند رسانش حرارتی بالا، پایداری حرارتی مطلوب، مقاومت بالا در برابر خوردگی و اکسیداسیون و ساختار لایه ای آن موجب شده است که کاربردهای زیادی در صنعت داشته باشد [9,10]. h-BN یک زیرلایه مناسب برای گرافن جهت ایجاد گاف در گرافن به وسیله شکست تقارن زیر شبکه ها می باشد. h-BN یک نیم رسانا با گاف نواری مستقیم بزرگ به اندازه  $4,64\text{ eV}$  است و به علت قابل کنترل بودن گاف انرژی، گزینه مناسبی برای کاربرد در قطعات نیم رسانا در نانوالکترونیک و اپتوالکترونیک است. محاسبات پیشین نشان می دهند که گاف نواری مستقیم h-BN تک لایه با افزایش تعداد لایه ها به گاف نواری غیر مستقیم تبدیل می شود و خواص اپتیکی آن نیز تغییر می کند [11-13]. h-BN تک لایه با جانشانی اتم بریلیم به نیم رسانای نوع p و با جانشانی اتم های نیتروژن، کربن، سیلیسیم یا گوگرد به نیم رسانای نوع n تبدیل می شود [14]. اعمال کرنش یک روش بسیار مهم برای تغییر خواص الکتریکی و اپتیکی نانو مواد دویعدی است [15-17]. برای مثال اعمال کرنش می تواند سرعت فرمی در گرافن را تغییر دهد [15]، همچنین خواص الکتریکی و مکانیکی h-BN تک لایه به وسیله اعمال کرنش قابل کنترل است [18-20]. در این مقاله اثر کرنش صفحه ای دو محوری بر روی خواص الکتریکی و اپتیکی h-BN دو لایه را با استفاده از روش تابعی چگالی بررسی می کنیم.

## نتایج و بحث

AA است و فاصله بین لایه‌ای آن  $3/21 \text{ \AA}$  و ثابت شبکه تعادلی آن  $2/49 \text{ \AA}$  می‌باشد. نتایج محاسبه شده با نتایج قبلی در تطابق می‌باشند [23 و 24]. شکل 1 ساختار نواری h-BN تک لایه و دو لایه را نشان می‌دهد. در همه موارد تراز فرمی در انرژی صفر قرار دارد.

برای h-BN دو لایه دو حالت برهم‌چینش AA و AB در نظر گرفته شده است. محاسبه انرژی کل این حالت‌ها نشان می‌دهد که حالت AB پایدارتر از حالت



شکل 1. ساختار نواری h-BN (الف) تک لایه و (ب) دو لایه بدون کرنش.

که در رابطه بالا  $a$  و  $a_0$  به ترتیب ثابت شبکه h-BN دو لایه تحت کرنش و بدون کرنش می‌باشند. با اعمال کرنش تراکمی، کمینه نوار رسانش در نقطه M نسبت به تراز فرمی به سمت بالا و لبه نوار رسانش در نقطه  $\Gamma$  نسبت به تراز فرمی به سمت پایین جابه‌جا می‌شود در حالی که بیشینه نوار ظرفیت در نقطه K باقی می‌ماند. به‌ازای 6% کرنش تراکمی گاف نواری h-BN دو لایه به گاف نواری غیر مستقیم در راستای K- $\Gamma$  تبدیل می‌شود (شکل 2).

با اعمال کرنش کششی، کمینه نوار رسانش در نقاط K و M نسبت به تراز فرمی به سمت پایین جابه‌جا می‌شود و گاف نواری کاهش می‌یابد که این نتیجه با نتایج محاسبات پیشین در توافق است [26]. کاهش گاف

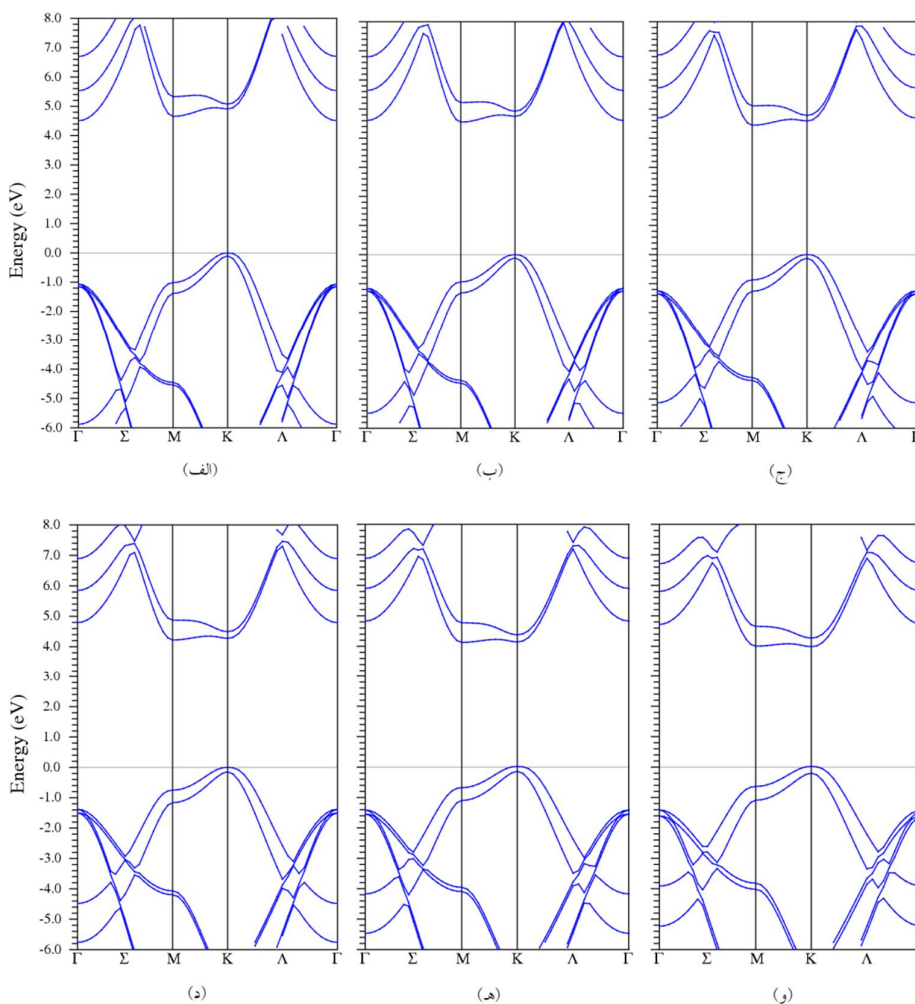
h-BN تک لایه دارای گاف مستقیم به اندازه  $4/60 \text{ eV}$  در راستای K-K می‌باشد، در حالی که h-BN دو لایه دارای گاف غیر مستقیم به اندازه  $4/33 \text{ eV}$  در راستای K-M است. نتایج به‌دست آمده با نتایج پیشین در توافق است [24-26]. گاف انرژی بزرگ در h-BN تک لایه و دو لایه به علت خاصیت یونی پیوند B-N در این دو ساختار است. با مقایسه ساختار نواری h-BN تک لایه و دو لایه مشاهده می‌کنیم که برهم‌کنش بین لایه‌ها باعث کاهش گاف نواری و شکافتگی ترازهای انرژی می‌شود.

کرنش صفحه‌ای دو محوری در h-BN دو لایه به صورت زیر تعریف می‌شود [26]:

$$\varepsilon = (a - a_0) / a_0 \quad 1$$

کاهش می‌یابد. راستا و اندازه گاف نواری محاسبه شده برای h-BN دو لایه تحت کرنش در جدول 1 آورده شده است.

نواری با افزایش کرنش کششی، مربوط به کاهش همپوشانی اوربیتال‌های p اتم‌های B و N با افزایش طول پیوند B-N است. تحت کرنش کششی، گاف نواری h-BN دو لایه در راستای K-M به  $4/01\text{eV}$



شکل 2. ساختار نواری h-BN دو لایه تحت الف: -6%، ب: -4%، ج: -2%، د: 2%، ه: 4% و و: 6% کرنش.

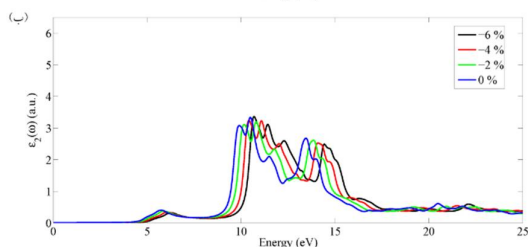
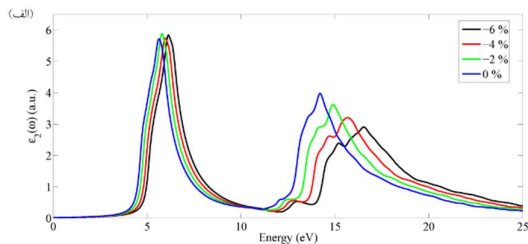
جدول 1. اندازه و راستای h-BN دو لایه تحت کرنش.

-6%	-4%	-2%	0%	2%	4%	6%
4/51	4/55	4/44	4/33	4/22	4/13	4/01
K- $\Gamma$	K-M	K-M	K-M	K-M	K-M	K-M

$$L(\omega) = -\text{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon(\omega)}\right) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} \quad 4$$

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2} + \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} \quad 5$$

قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، طیف اتلاف انرژی و ضریب شکست در دو راستای میدان اعمالی موازی با صفحه h-BN دو لایه (راستای X) و میدان اعمالی عمود بر صفحه h-BN دو لایه (راستای Z) محاسبه می‌شوند. همان‌طور که در شکل‌های 3 تا 10 نشان داده شده است تابع دی‌الکتریک، طیف اتلاف انرژی و ضریب شکست h-BN دو لایه در دو راستای X و Z ناهمسانگرد هستند. شدت و میزان نوسان تابع دی‌الکتریک، طیف اتلاف انرژی و ضریب شکست در راستای X بیشتر از راستای Z است.



شکل 3. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک h-BN دو لایه در راستای الف: X و ب: Z تحت کرنش تراکمی.

از قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک برای بررسی گذارهای بین نواری استفاده می‌شود. در راستای X،

در ادامه به بررسی اثر کرنش صفحه‌ای دو محوری بر روی خواص اپتیکی h-BN دو لایه می‌پردازیم. خواص اپتیکی با محاسبه تابع دی‌الکتریک  $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$  و طیف اتلاف انرژی الکترون بررسی می‌شوند. تابع دی‌الکتریک برای توصیف پاسخ ماده به میدان الکترومغناطیسی به کار برده می‌شود. به علت نیم‌رسانا بودن ترکیب مورد نظر و کوچک بودن سهم گذارهای درون نواری، در محاسبه این تابع تنها سهم گذارهای اپتیکی بین نواری در نظر گرفته شده است.

قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک با محاسبه عناصر ماتریس اندازه‌حرکت بین توابع موج اشغال شده و اشغال نشده و بر طبق فرمول زیر محاسبه می‌شود [27]:

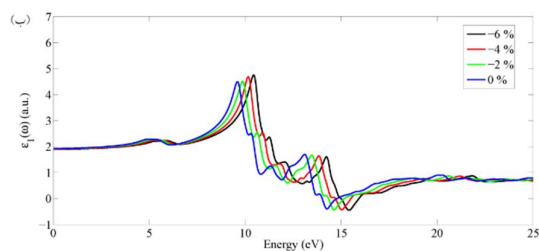
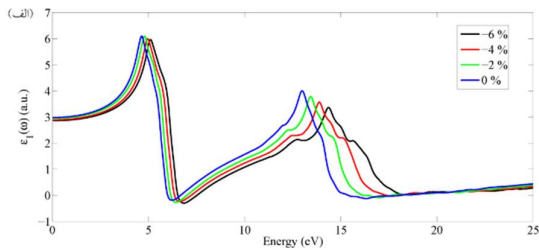
$$\text{Im} \varepsilon^{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{i,f} \int \frac{2dk^3}{(2\pi)^3} f_i^k (1 - f_f^k) |\langle ik | P_\alpha | fk \rangle|^2 \delta(E_f^k - E_i^k - \hbar\omega) \quad 2$$

در رابطه بالا  $i$  و  $f$  حالت‌های اولیه و نهایی را نشان می‌دهند. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک نیز، برحسب قسمت موهومی آن و از طریق رابطه کرامرز-کرونینگ محاسبه می‌شود [28]:

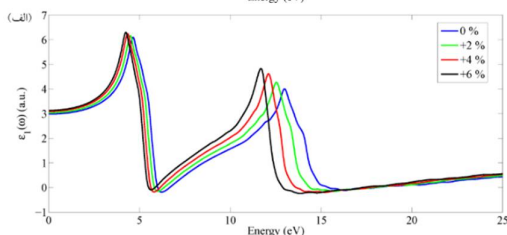
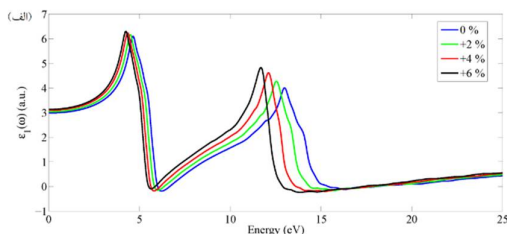
$$\text{Re} \varepsilon^{\alpha\alpha}(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \text{Im} \varepsilon^{\alpha\alpha}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad 3$$

با استفاده از  $\varepsilon_1(\omega)$  و  $\varepsilon_2(\omega)$  تمام خواص نوری دیگر را می‌توان محاسبه کرد. تابع اتلاف انرژی و ضریب شکست برحسب قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک به صورت زیر فرمول‌بندی می‌شوند [28]:

با اعمال کرنش مقدار ثابت دی الکتریک در راستای Z تقریباً بدون تغییر می ماند. با اعمال کرنش -6% تا +6% مقدار ثابت دی الکتریک در راستای X از 2,85 به 3,13 افزایش می یابد.



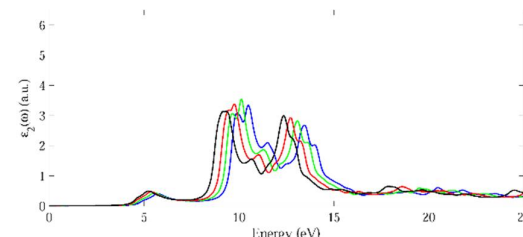
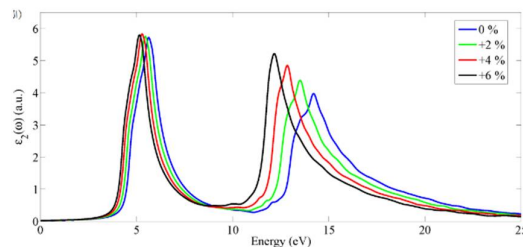
شکل 5. قسمت حقیقی تابع دی الکتریک h-BN دو لایه در راستای الف: X و ب: Z تحت کرنش تراکمی.



شکل 6. قسمت حقیقی تابع دی الکتریک h-BN دو لایه در راستای الف: X و ب: Z تحت کرنش کششی.

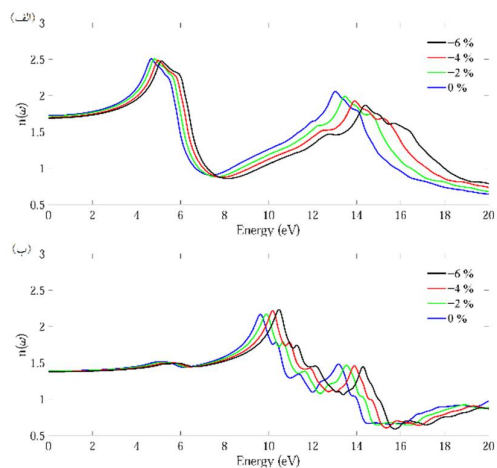
تابع اتلاف انرژی الکترون متناسب با احتمال اتلاف انرژی در واحد طول برای یک الکترون در حال عبور از ماده است. قله هایی که در نمودار تابع اتلاف دیده

جذب اپتیکی از محدوده گاف انرژی 4/33eV شروع می شود. بنابراین گاف اپتیکی و گاف الکتریکی با هم برابر هستند. هنگامی که موج الکترومغناطیسی به ماده تابیده می شود برای فوتون های با پهنای کمتر از پهنای گاف، چون فوتون نمی تواند منجر به ایجاد گذار شود، جذبی صورت نمی گیرد و بنابراین قسمت موهومی تابع دی الکتریک برابر با صفر می شود. در نواحی که انرژی فوتون برابر با اختلاف انرژی یک جفت نوار رسانش و ظرفیت باشد،  $\epsilon_2(\omega)$  بیشینه می شود. در حالت بدون کرنش، قله جذب در راستای X، در انرژی 5/6eV قرار دارد و بیشترین جذب در راستای Z، در بازه انرژی بین 9 تا 15eV است. در انرژی های کمتر از 9eV،  $\epsilon_2(\omega)$  در راستای Z، دارای قله کوچکی حول 5/8eV است. مقدار  $\epsilon_1(\omega)$  در انرژی صفر، ثابت دی الکتریک را نشان می دهد. ثابت دی الکتریک h-BN دو لایه بدون کرنش در راستای X، برابر 2/98 و در راستای Z، برابر 1/93 است. نمودار  $\epsilon_1(\omega)$  محاسبه شده برای h-BN دو لایه در راستای X، در بازه انرژی 6/0 تا 6/6eV و در راستای Z، در بازه انرژی 14/0 تا 14/7eV منفی می شود.

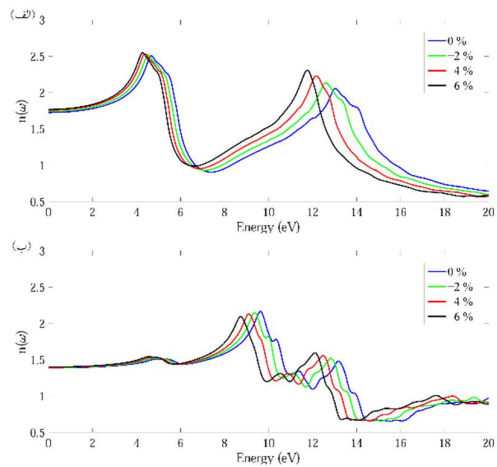


شکل 4. قسمت موهومی تابع دی الکتریک h-BN دو لایه در راستای الف: X و ب: Z تحت کرنش کششی.

و یک قله پهن و بزرگ در  $22,1\text{eV}$  است. طیف اتلاف انرژی الکترون در راستای z، دارای بیشینه‌ای در  $16,0\text{eV}$  است.



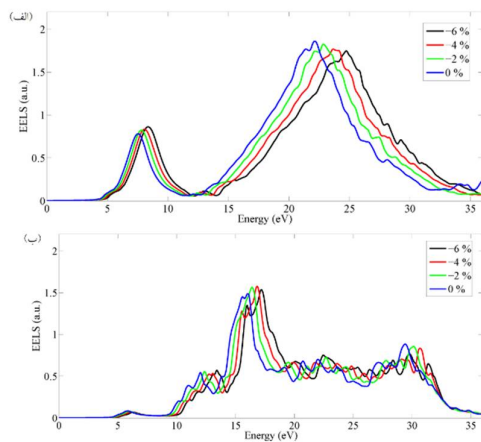
شکل 9. ضریب شکست h-BN دو لایه در راستای الف: X و ب: z تحت کرنش تراکمی.



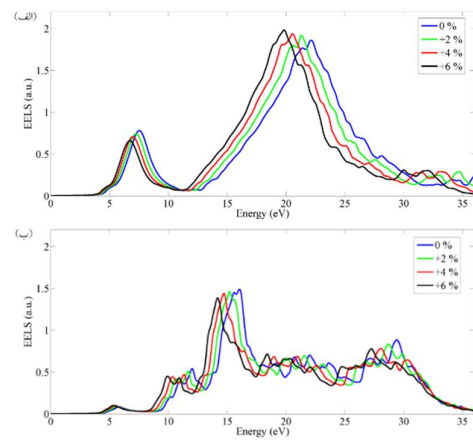
شکل 10. ضریب شکست h-BN دو لایه در راستای الف: X و ب: z تحت کرنش کششی.

ضریب شکست  $n(\omega)$  یک ثابت اپتیکی مهم در تعیین ویژگی‌های نوری مواد است. از شکل 10 مشاهده می‌شود که ضریب شکست رفتاری مشابه با قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک دارد. مقدار ضریب شکست در انرژی صفر، ضریب شکست استاتیکی را نشان می‌دهد.

می‌شوند تشدید پلاسمایی را نشان می‌دهند. بنابراین انرژی متناظر با آنها انرژی تشدید پلاسمای می‌باشد.



شکل 7. طیف اتلاف انرژی h-BN دو لایه در راستای الف: X و ب: z تحت کرنش تراکمی.



شکل 8. طیف اتلاف انرژی h-BN دو لایه در راستای الف: X و ب: z تحت کرنش کششی.

شکل‌های 7 و 8 طیف اتلاف انرژی محاسبه شده برای h-BN دو لایه را بدون کرنش و تحت کرنش نشان می‌دهند. در حالت بدون کرنش، طیف اتلاف انرژی الکترون در راستای x، شامل یک قله کوچک در  $7,5\text{eV}$



*Journal of Applied Physics* 115 (2014) 153701-153706.

<https://doi.org/10.1063/1.4871465>

[3] S.Y. Zhou, G.H. Gweon, A.V. Fedorov, P.N. First, W.A. de Heer, D.H. Lee, F. Guinea, A.H. Castro Neto, A. Lanzara, Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene, *Nature Materials* 6 (2007) 770-775.

<https://doi.org/10.1038/nmat2003>

[4] Y.-W. Son, M.L. Cohen, S.G. Louie, Energy Gaps in Graphene Nanoribbons, *Physical Review Letters* 97 (2006) 216803-2168037.

[10.1103/PhysRevLett.97.216803](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.216803)

[5] V.M. Pereira, A.H. Castro Neto, N.M.R. Peres, Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene, *Physical Review B* 80 (2009) 045401-045409.

<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.045401>

[6] F. Xia, D.B. Farmer, Y.-m. Lin, P. Avouris, Graphene Field-Effect Transistors with High On/Off Current Ratio and Large Transport Band Gap at Room Temperature, *Nano Letters* 10 (2010) 715-718.

<https://doi.org/10.1021/nl9039636>

[7] Y. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M.C. Martin, A. Zettl, M.F. Crommie, Y.R. Shen, F. Wang, Direct observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene, *Nature* 459 (2009) 820-823.

<https://doi.org/10.1038/nature08105>

[8] M. Topsakal, E. Aktürk, S. Ciraci, First-principles study of two- and one-dimensional honeycomb structures of boron nitride, *Physical Review B* 79 (2009) 115442-115453.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.115442>

[9] L.H. Li, J. Cervenka, K. Watanabe, T. Taniguchi and Y. Chen, Strong Oxidation Resistance of Atomically Thin Boron

در حالت بدون کرنش، ضریب شکست استاتیکی h-BN دو لایه در راستای X برابر 1/72 و در راستای Z برابر 1/39 است. همانطور که در شکل های 9 و 10 نشان داده شده است با اعمال کرنش تراکمی (کششی) ضریب شکست استاتیکی کاهش (افزایش) می یابد. همانطور که در شکل های 3 تا 10 مشاهده می شود، با اعمال کرنش تراکمی (کششی) توابع اپتیکی h-BN دو لایه به سمت انرژی های بیشتر (کمتر) جابه جا می شوند.

### نتیجه گیری

در این مقاله اثر کرنش بر روی ساختار نواری، تابع دی الکتریک، طیف اتلاف انرژی و ضریب شکست h-BN دو لایه بررسی شده است. گاف نواری h-BN دو لایه کوچکتر از h-BN تک لایه است و برهم کنش بین لایه ها باعث شکافتگی ترازهای انرژی در h-BN دو لایه می شود. با اعمال کرنش می توان اندازه و راستای گاف انرژی را کنترل کرد. ثابت دی الکتریک h-BN دو لایه در حالت بدون کرنش در راستای X، برابر 2/98 و در راستای Z، برابر 1/93 می باشد توابع اپتیکی، شامل تابع دی الکتریک، طیف اتلاف انرژی و ضریب شکست در راستای X و Z، با اعمال تنش تراکمی (کششی) به سمت انرژی های بیشتر (کمتر) جابه جا می شوند. با اعمال کرنش مقدار ثابت دی الکتریک در راستای Z تقریباً بدون تغییر می ماند. با اعمال کرنش 6٪ تا 6٪+ مقدار ثابت دی الکتریک در راستای X از 2/85 به 3/13 افزایش می یابد. نتایج به دست آمده می تواند در طراحی دستگاه های اپتو الکترونیکی جدید استفاده شود.

### مرجع ها

[1] F. Guinea, M.I. Katsnelson, A.K. Geim, Energy gaps and a zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering, *Nature Physics* 6 (2009) 30-33.  
<https://doi.org/10.1038/nphys1420>

[2] Y. Fujimoto, S. Saito, Hydrogen adsorption and anomalous electronic properties of nitrogen-doped graphene,

- [16] D. Moldovan, F.M. Peeters, Strain engineering of the electronic properties of bilayer graphene quantum dots, *physica status solidi (RRL) – Rapid Research Letters* 10 (2016) 39-45.  
<https://doi.org/10.1002/pssr.201510228>
- [17] X. Zhong, Y.K. Yap, R. Pandey and S.P. Karna, First-principles study of strain-induced modulation of energy gaps of graphene/BN and BN bilayers, *Physical Review B* 83 (2011) 193403-193407.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.193403>
- [18] Y. Fujimoto, S. Saito, Effects of strain on carbon donors and acceptors in hexagonal boron nitride monolayers, *Physical Review B* 93 (2016) 045402-045409.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.045402>
- [19] T. Han, Y. Luo and C. Wang, Effects of temperature and strain rate on the mechanical properties of hexagonal boron nitride nanosheets, *Journal of Physics D: Applied Physics* 47 (2013) 025303-025311.  
<https://doi.org/10.1088/0022-3727/47/2/025303>
- [20] Y. Fujimoto, T. Koretsune and S. Saito, Electronic structures of hexagonal boron-nitride monolayer: strain-induced effects, *Journal of the Ceramic Society of Japan*, 122 (2014) 346-348.  
<https://doi.org/10.2109/jcersj2.122.346>
- [21] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Vienna University of Technology, Austria, 2001).
- [22] J.P. Perdew, A. Zunger, Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Physical Review B* 23 (1981) 5048-5079.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.23.5048>
- Nitride Nanosheets, *ACS Nano* 8 (2014) 1457-1462.  
<https://doi.org/10.1021/nn500059s>
- [10] Q. Cai, D. Scullion, W. Gan, A. Falin, S. Zhang, K. Watanabe, T. Taniguchi, Y. Chen, E.J.G. Santos, L.H. Li, High thermal conductivity of high-quality monolayer boron nitride and its thermal expansion, *Science Advances* 5 (2019) 129-137.  
<https://doi.org/10.1126/sciadv.aav0129>
- [11] L. Sponza, H. Amara, C. Attaccalite, S. Latil, T. Galvani, F. Paleari, L. Wirtz and F. Ducastelle, Direct and indirect excitons in boron nitride polymorphs: A story of atomic configuration and electronic correlation, *Physical Review B* 98 (2018) 125206-125223.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.125206>
- [12] J. Kang, L. Zhang, S.H. Wei, A Unified Understanding of the Thickness-Dependent Bandgap Transition in Hexagonal Two-Dimensional Semiconductors, *The Journal of Physical Chemistry Letters* 7 (2016) 597-602.  
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.5b02687>
- [13] L. Wang, Y. Pu, A.K. Soh, Y. Shi and S. Liu, Layers dependent dielectric properties of two dimensional hexagonal boron nitridenanosheets, *AIP Advances* 6 (2016) 125126-125132.  
<https://doi.org/10.1063/1.4973566>
- [14] K. Zhang, Y. Feng, F. Wang, Z. Yang and J. Wang, Two dimensional hexagonal boron nitride (2D-hBN): synthesis, properties and applications, *Journal of Materials Chemistry C* 5 (2017) 11992-12022.  
<https://doi.org/10.1039/C7TC04300G>
- [15] S.-M. Choi, S.-H. Jhi, Y.-W. Son, Effects of strain on electronic properties of graphene, *Physical Review B* 81 (2010) 081407-081411.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.081407>

[23] W.-Q. Han, L. Wu, Y. Zhu, K. Watanabe, T. Taniguchi, Structure of chemically derived mono- and few-atomic-layer boron nitride sheets, *Applied Physics Letters* 93 (2008) 223103-223106.

<https://doi.org/10.1063/1.3041639>

[24] Z. Yang, J. Ni, Modulation of electronic properties of hexagonal boron nitride bilayers by an electric field: A first principles study, *Journal of Applied Physics* 107 (2010) 104301-104305.

<https://doi.org/10.1063/1.3373571>

[25] G.-Y. Guo, Systematic ab initio study of the optical properties of BN nanotubes, *Physical Review B* 71 (2005) 165402-165414.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.165402>

[26] Y. Fujimoto, S. Saito, Band engineering and relative stabilities of hexagonal boron nitride bilayers under biaxial strain, *Physical Review B* 94 (2016) 245427-245435.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.245427>

[27] R. Abt, C. Ambrosch-Draxl, P. Knoll, Optical response of high temperature superconductors by full potential LAPW band structure calculations, *Physica B: Condensed Matter* 194-196 (1994) 1451-1452.

[https://doi.org/10.1016/0921-4526\(94\)91225-4](https://doi.org/10.1016/0921-4526(94)91225-4)

[28] C.F. Klingshirn, "Semiconductor Optics", Springer (2006).