

ZnS 类石墨烯热膨胀系数、弹性模量 以及有效电荷变化规律研究^①

龙怡希^{1,2}, 任晓霞¹, 张皓³

1. 重庆市高校新型储能器件及应用工程研究中心 重庆文理学院, 重庆 永川 402160;

2. 重庆文理学院 数学与财经学院, 重庆 永川 402160; 3. 重庆文理学院 材料与化工学院, 重庆 永川 402160

摘要: 考虑到形变和原子的非简谐振动, 用固体物理方法, 研究了 ZnS 类石墨烯的热膨胀系数和弹性模量随温度的变化规律以及有效电荷和极性与形变的关系, 探讨了形变和原子非简谐振动对它们的影响. 结果表明: ① ZnS 类石墨烯的热膨胀系数为负值, 数值在 $1.178 \times 10^{-3} \sim 22.323 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ 之间随着温度升高而增大; 而弹性模量在 $0.241 \sim 453.253 \text{ GPa}$ 之间随着温度的升高而增大. ② 简谐近似下, 热膨胀系数为零, 弹性模量为常量; 考虑非简谐项后它们才随温度升高而变化, 温度愈高, 非简谐效应愈显著. ③ 大小形变、剪切形变、单轴形变这 3 种形变中, 大小形变对正有效电荷、单轴形变对负有效电荷影响最大, 剪切形变对正、负有效电荷影响最小; ④ 大小形变对极性的影响可达到 70.4%, 而剪切形变的影响仅为 46.5%.

关键词: ZnS 类石墨烯; 热膨胀系数; 弹性模量; 有效电荷; 形变; 非简谐效应

中图分类号: O482.3

文献标志码: A

文章编号: 1000-5471(2019)09-0021-06

硫化锌(ZnS)是典型的直接带隙半导体, 具有良好的光学性能和电学性能, 在光电器件、LED 材料等诸多领域应用广泛, 目前已有一些文献对三维 ZnS 材料的性质, 特别是光学性质进行了研究^[1-3]. 文献[4]的研究发现: SiC, ZnS 等除具有三维结构外, 还具有与石墨烯类似的二维六角结构, 人们将这类材料称为类石墨烯. 文献[5-7]用密度泛函方法研究了 SiC 等二维类石墨烯的稳定性, 证明了这些化合物可以存在. 这类材料因其独特的性质和广泛的应用前景, 已引起人们极大的兴趣, 并对它们的性能进行了一些研究. 文献[8]利用哈里森键联轨道法, 研究了 $A_N B_{8-N}$ 化合物的弹性和介电性质, 文献[9]还研究了 π 键对类石墨烯的有效电荷、内聚能和力常数的贡献, 但这些研究未对具体物质作计算分析, 特别是对具有重要应用价值的光电材料 ZnS 类石墨烯的热力学性质研究很少, 而且研究中认为原子是静止的, 其结果不能反映其性质随温度的变化规律. 文献[10-11]研究表明: ZnS 类石墨烯这类二维结构, 存在大小、剪切等多种形变, 这些形变和原子的非简谐振动对 ZnS 类石墨烯的性质有重要的影响. 探索它的热膨胀系数、弹性模量和有效电荷等的变化规律和特点, 无论在实际应用还是理论上都是一个待解决的重要问题. 为此, 本文将在考虑到形变和原子作非简谐振动情况下, 应用固体物理理论和方法, 对这一问题进行研究.

1 物理模型、简谐系数和非简谐系数

ZnS 类石墨烯是由 Zn 原子和 S 原子构成的二维六角格子平面系统, 设这两种原子各自总原子数为 N , 最近邻原子间距离为 d (称键长), 取任一原子为坐标系原点, 平面为 OXY 平面, $\varphi(d)$ 轴垂直向上, 坐标系选取见图 1.

① 收稿日期: 2018-06-19

基金项目: 重庆市教委科技项目(KJ1601118, KJ1601111).

作者简介: 龙怡希(1998-), 女, 主要从事应用数学研究.

通信作者: 任晓霞, 副教授.

按文献[9], 考虑到短程作用后, ZnS 类石墨烯的原子相互作用能为

$$\varphi(d) = -\frac{2V_2}{\alpha_c} \left[1 - \frac{2}{3}\alpha_c^2 + \frac{3\alpha_c C}{V_2} + \frac{2}{9}\alpha_c^4(6\alpha_c^2 - 1) \frac{V_1^2}{V_2^2} \right] - \frac{2V_2^*}{\sqrt{3}\alpha_c^*} \left(1 - \frac{2}{3}\alpha_c^{*2} \right) \quad (1)$$

其中, V_1 为金属化能, $V_2 = \eta \hbar^2 / md^2$ 是 σ 键的共价能, $\eta = 3.26$; $V_2^* = \eta_{p\pi} \hbar^2 / md^2$ 是 π 键的共价能, $\eta_{p\pi} = 0.63$ (文献[12]); V_3 和 V_3^* 分别是 σ 键和 π 键的极化能, α_p 和 α_p^* 分别是 σ 键和 π 键的极性参量, 而 α_c 和 α_c^* 分别是 σ 键和 π 键的共价参量, 其值为:

$$\alpha_p = V_3 / (V_2^2 + V_3^2)^{1/2}, \quad \alpha_p^* = V_3^* / (V_2^{*2} + V_3^{*2})^{1/2} \quad (2)$$

$$\alpha_c = V_2 / (V_2^2 + V_3^2)^{1/2}, \quad \alpha_c^* = V_2^* / (V_2^{*2} + V_3^{*2})^{1/2}$$

式中的常数 C 为短程作用参量, 文献[10] 给出 $C = 0.20$ eV.

为了克服文献[9] 不能研究热力学性质随温度变化规律的不足, 本文认为, 在(1) 式所示原子相互作用能的作用下, 原子不是静止的, 而是在平面内在平衡位置附近作非简谐振动. 将 $\varphi(d)$ 在平衡位置 d_0 附近展开, 偏离 $\delta = d - d_0$ 很小时, 有

$$\varphi(\delta) = \varphi(d_0) + \frac{1}{2}\epsilon_0\delta^2 + \epsilon_1\delta^3 + \epsilon_2\delta^4 + \dots \quad (3)$$

其中, $\epsilon_0, \epsilon_1, \epsilon_2$ 分别是简谐系数、第一和第二非简谐系数. 由(1) 式求得:

$$\epsilon_0 = \frac{4}{d_0^2}\alpha_c V_2 \left\{ 1 - 2\alpha_p^2 + \frac{54C}{\alpha_c V_2} - \frac{10}{3}\alpha_c^2(1 - 6\alpha_c^2\alpha_p^2 - \frac{3}{5}\alpha_p^2) \frac{V_1^2}{V_2^2} \right\} + \frac{4\alpha_c^* V_2^*}{\sqrt{3}d_0^2}(1 - 2\alpha_p^{*2}) \quad (4)$$

$$\epsilon_1 = -\frac{4\alpha_c}{d^3} \left\{ \left(V_2 - \frac{1}{3}\alpha_c^2 V_2 - 2\alpha_c \alpha_p V_3 + 2\alpha_c^3 \alpha_p V_3 \right) + \left(-\frac{10}{3}\alpha_c + 2\alpha_c \alpha_p^2 + \frac{10}{3}\alpha_c^3 + 30\alpha_c^3 \alpha_p \right) \frac{V_1^2}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2}} \right\} \quad (5)$$

$$\epsilon_2 = -\frac{\alpha_c}{d^4} \left\{ \left(-7 - \frac{17}{3}\alpha_c^2 + 6\alpha_c^4 \right) V_2 + (-14\alpha_c + 34\alpha_c^3 - 20\alpha_c^5) \alpha_p V_3 + \left(-\frac{70}{3}\alpha_c + \frac{170}{3}\alpha_c^3 + \alpha_c \alpha_p^2 - \frac{100}{3}\alpha_c^5 + 310\alpha_c^3 \alpha_p^2 - 420\alpha_c^5 \alpha_p^2 \right) \frac{V_1^2}{\sqrt{V_1^2 + V_2^2}} \right\} \quad (6)$$

2 ZnS 的热膨胀系数和弹性模量随温度的变化规律

当温度不太高时, 键长的平均位移 $\bar{\xi}$ 与温度的关系为^[11]

$$\bar{\xi} = -\frac{3\epsilon_1 k_B T}{\epsilon_0^2} \left[1 + \frac{3\epsilon_2 k_B T}{\epsilon_0^2} + \left(\frac{3\epsilon_2 k_B T}{\epsilon_0^2} \right)^2 \right] \quad (7)$$

由(7) 式求得在温度不太低和不太高时的热膨胀系数 $\alpha_l = \frac{1}{d_0} \frac{d\bar{\xi}}{dT}$ 为

$$\alpha_l = \frac{1}{d_0} \frac{3\epsilon_1 k_B}{\epsilon_0^2} \left(1 + \frac{4\epsilon_2 k_B^2 T}{\epsilon_0^2} + \frac{27\epsilon_2^2 k_B^3 T^2}{\epsilon_0^4} \right) \quad (8)$$

弹性模量 B 随温度的变化为

$$B(T) = \frac{\epsilon_0}{\Omega} [d_0 (1 + \alpha_l T)]^2 \quad (9)$$

其中, Ω 为 ZnS 类石墨烯的原胞面积, 它与最近邻原子间距离 d_0 的关系为 $\Omega = (\sqrt{3}/2)d_0^2$.

3 ZnSe 的有效电荷

有效电荷, 是指化合物中的实际电荷. 当正、负离子组成化合物时, 有效电荷与它们单独存在时的电荷不同. 对 ZnS 类石墨烯, 正、负离子有效电荷(以 e 为单位) 分别为^[9]

$$Z_+ = \alpha_p + \alpha_p^* \quad (10)$$

$$Z_- = -7\alpha_p - \alpha_p^*$$

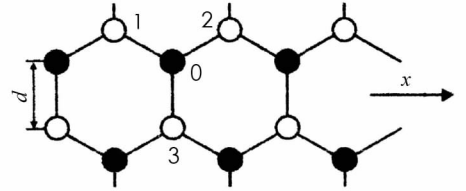


图 1 类石墨烯化合物的结构示意图

类石墨烯是二维材料, 易发生形变, 造成极性参量发生改变, 进而引起有效电荷发生改变. 它所发生的形变, 包括两离子间距离变化的大小形变(图 2(a)、系统绕垂直平面的轴发生旋转的剪切形变(图 2(b)), 还有单轴形变(图 3) 等.

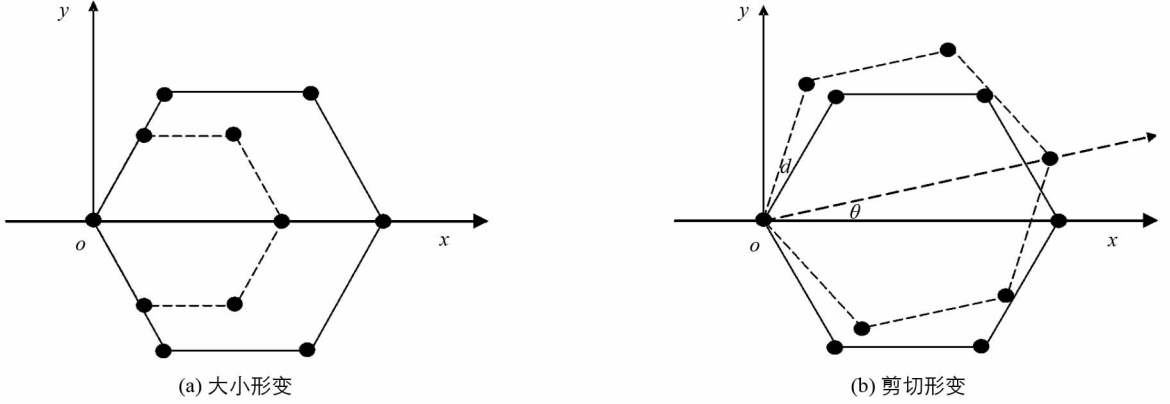


图 2 类石墨烯的大小形变和剪切形变

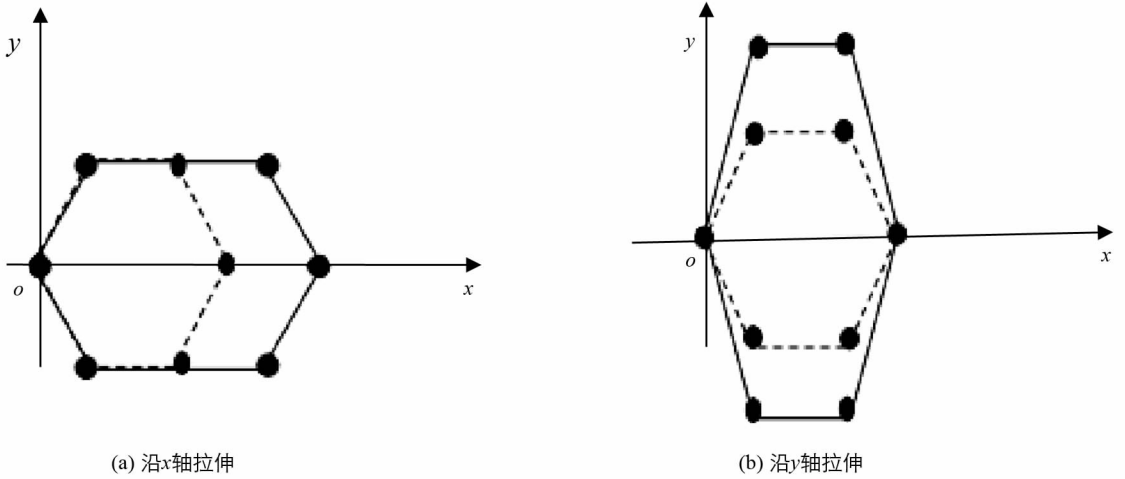


图 3 单轴形变

形变使其极性参量发生改变. 大小形变使极性参量由 α_p 改变为 α'_p , α_p^* 改变为 α'^*_p . 它们对 d 的相对变化量 $\delta_p = d_0 (\partial \alpha_p / \partial d)_{d_0}$, $\delta_p^* = d_0 (\partial \alpha_p^* / \partial d_0)_{d_0}$ 称为键长形变极性变化率, 剪切形变引起的对 θ 的变化 $\tau_p = (\partial^2 \alpha_p / \partial \theta^2)_{\theta=0}$, $\tau_p^* = (\partial^2 \alpha_p^* / \partial \theta^2)_{\theta=0}$ 称为剪切形变极性变化率. 由 α_p 和 V_2 的表示式可求得:

$$\begin{aligned} \delta_p &= 2\alpha_p(1 - \alpha_p^2) \\ \delta_p^* &= 2\alpha_p^*(1 - \alpha_p^{*2}) \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \tau_p &= 2\lambda\alpha_p(1 - \alpha_p^2) \\ \tau_p^* &= 2\lambda\alpha_p^*(1 - \alpha_p^{*2}) \end{aligned} \quad (12)$$

这里的 λ 为表征剪切形变引起共价能 V_2 变化程度的参量, 按文献[13], 取 $\lambda = 0.66$.

类石墨烯的极性改变, 导致键长等的变化, 进而导致 ZnS 有效电荷发生改变.

大小形变造成有效电荷 Z_+ , Z_- 的改变随键长的变化率 $\zeta_{\pm} = (\partial Z_{\pm} / \partial d)_{d_0}$ 经计算为:

$$\zeta_+ = 3\delta_p + \delta_p^* \quad \zeta_- = -3\delta_p - \delta_p^* \quad (13)$$

剪切形变引起正负离子有效电荷改变量随转角 θ 的变化率 $\eta_{\pm} = (\partial^2 Z_{\pm} / \partial \theta^2)_{\theta=0}$ 经计算为:

$$\eta_+ = 3\lambda\delta_p \quad \eta_- = -3\lambda\delta_p \quad (14)$$

单轴形变因改变离子电荷分布而产生有效电荷, 其中, 沿 x 轴的单轴形变产生的有效电荷为:

$$\begin{aligned} Z_{+x} &= Z_+ + \left(\delta_p + \frac{1}{3}\delta_p^* \right) \frac{3 - \zeta}{2\zeta} \\ Z_{-x} &= Z_- + \left(\delta_p + \frac{1}{3}\delta_p^* \right) \frac{3 - \zeta}{2\zeta} \end{aligned} \quad (15)$$

式中 ζ 为黎曼相对位移参量, 由 $\zeta = (1 - \lambda)/(1 + \lambda)$ 求得.

沿 y 轴轴向形变产生新的有效原子电荷为:

$$Z_{+y} = Z_+ + \frac{1}{2} \left(\delta_p + \frac{1}{3} \delta_p^* \right)$$
$$Z_{-y} = Z_- + \frac{1}{2} \left(\delta_p + \frac{1}{3} \delta_p^* \right)$$

(16)

由(13) – (16) 式, 可得几种形变造成的 ZnS 类石墨烯的正、负有效电荷(以 e 为单位) 的改变量 ΔZ_+ , ΔZ_- 为:

$$\Delta Z_+ = \xi_+ \Delta d + \eta_+ \Delta \theta^2 + Z_{+x} + Z_{+y}$$
$$\Delta Z_- = \xi_- \Delta d + \eta_- \Delta \theta^2 + Z_{-x} + Z_{-y}$$

(17)

由(10) 和(17) 式, 就得到 ZnS 类石墨烯形变后的有效电荷 $Z'_\pm = Z_\pm + \Delta Z_\pm$.

4 形变和非简谐振动对 ZnS 类石墨烯热膨胀和弹性模量以及有效电荷的影响

文献[8] 给出 ZnS 类石墨烯有关数据为: $d_0 = 2.19 \times 10^{-10} \text{ m}$, $V_1 = 2.80 \text{ eV}$, $V_2 = 7.75 \text{ eV}$, $V_2^* = 1.52 \text{ eV}$, $V_3^* = 2.94 \text{ eV}$, 由(2) 式求得 $\alpha_p = 0.710$, $\alpha_p^* = 5.221$, $\alpha_c = 0.704$, $\alpha_c^* = 0.141$. 代入(4)、(5)、(6) 式, 求得: $\epsilon_0 = 3.97 \times 10^2 \text{ J/m}^2$, $\epsilon_1 = -2.53 \times 10^{12} \text{ J/m}^3$, $\epsilon_2 = 3.20 \times 10^{22} \text{ J/m}^4$. 还可求得 $\Omega = 4.154 \times 10^{-20} \text{ m}^3$. 将 $\epsilon_0, \epsilon_1, \epsilon_2$ 以及玻尔兹曼常数 k_B 代入(8) 式和(9) 式, 得到 ZnS 类石墨烯热膨胀系数和弹性模量随温度的变化见表 1. 表中的(0), (1), (2) 分别是简谐近似、计算到第一非谐项、同时计算到第一、二非谐项的结果. 变化曲线见图 4.

表 1 ZnS 类石墨烯的热膨胀系数和弹性模量随温度的变化

T/K		300	750	1 300
$\alpha_l/10^{-3} \text{ K}^{-1}$	(0)	0	0	0
	(1)	− 1.177 794 021	− 7.414 827 032 06	− 22.323 403 56
	(2)	− 1.177 794 024	− 7.414 827 032 07	− 22.323 403 56
B/GPa	(0)	0	0	0
	(1)	0.241 405	13.228 27	453.253 5
	(2)	0.241 402	13.228 28	453.253 5

由表 1 和图 4 看出: ① 在所讨论的温度范围内, ZnS 类石墨烯的热膨胀系数 α_l 为负值, 且随温度升高而数值增大, 其数值在 $1.178 \times 10^{-3} - 22.323 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ 之间; ② ZnS 类石墨烯的弹性模量随温度升高而增大, 其数值在 $0.241 405 \sim 453.253 5 \text{ GPa}$ 之间, 其中, 温度低于 700 K 时变化很小, 而温度高于 700 K 后则迅速增大; ③ 简谐近似下的热膨胀系数为零, 弹性模量为常量. 考虑非简谐项后, α_l 和 B 均随温度升高而变化. 温度愈高, 非简谐效应愈显著; ④ 第一非谐项和第二非谐项引起的 α_l 和 B 的差异极小.

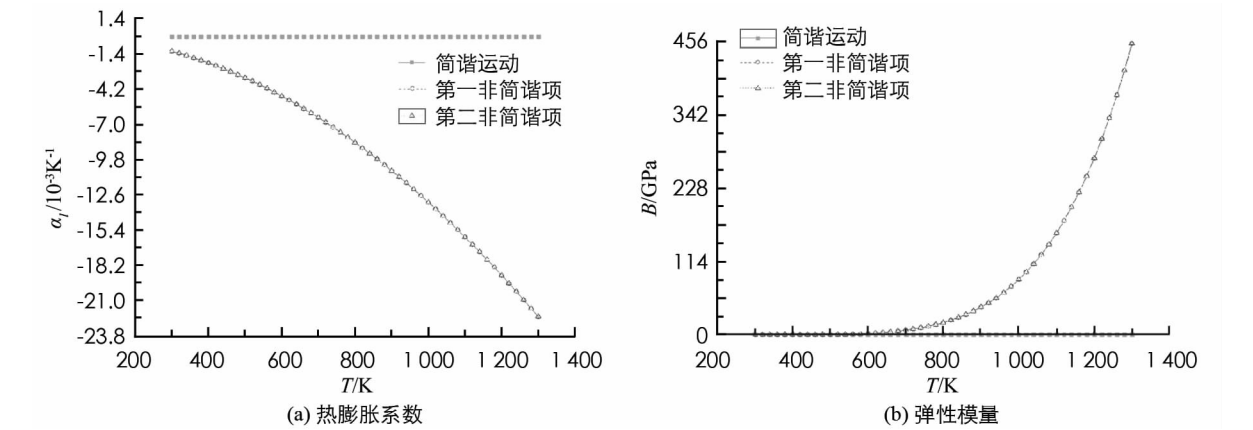


图 4 ZnS 的热膨胀系数和弹性模量随温度的变化

将文献[14] 以及前面计算的 α_p 等数据代入(11)、(12) 式, 求得: ZnS 类石墨烯的大小形变和剪切形变引起的极性变化率 $\delta_p, \delta_p^*, \tau_p$ 分别为: $\delta_p = 0.704$, $\delta_p^* = 0.039$, $\tau_p = 0.465$. 这表明: ① 大小形变引起键长形变极性变化率比剪切形变引起的极性变化率大, 大小形变对其影响可达到 70.4%, 剪切形变对其影响仅

为 46.5%；② 形变使 ZnS 类石墨烯的极性参量变大，而共价参量变小。

将上述数据代入(13)和(14)式，得到 ZnS 类石墨烯 的 3 种形变对 ZnS 的几个有效电荷的影响参量(ζ_+ ， ζ_- ， η_+ ， η_-)，结果是：对大小形变， $\zeta_+ = 2.820$ ， $\zeta_- = -2.820$ ；对剪切形变， $\eta_+ = 1.395$ ， $\eta_- = -1.395$ 。其余形变的 ζ_+ ， ζ_- ， η_+ ， η_- 均为零。这表明：① 单轴形变不会引起 ZnS 类石墨烯正负离子有效电荷的变化，而大小形变引起的变化比剪切形变引起的变化要大；② 大小形变与剪切形变引起的正负离子有效电荷的变化相同。

将上述数据代入(15)–(16)式，求得：ZnS 类石墨烯的有效电荷形变前为： $Z_+ = 1.417$ ， $Z_- = -5.676$ ，而形变后为 $Z'_+ = 4.658$ ， $Z'_- = -16.621$ 。其中大小形变、剪切形变、单轴形变对形变后有效电荷的贡献见表 2，而形变前后总有效电荷的变化见图 5。

表 2 几种形变对 ZnS 类石墨烯的有效电荷贡献的比较

形 变	$Z'_+(e)$				$Z'_-(e)$			
	$\zeta_+ \Delta d$ (10^{-6})	$\eta_+ (\Delta\theta)^2$ (10^{-12})	Z_{+x}	Z_{+y}	$\zeta_- \Delta d$ (10^{-6})	$\eta_- (\Delta\theta)^2$ (10^{-12})	Z_{-x}	Z_{-y}
大小形变	6.176	0	0	0	-6.176	0	0	0
剪切形变	0	1.395	0	0	0	-1.395	0	0
单轴形变	0	0	1.354	1.887	0	0	-5.739	-5.206

由表 2 和图 5 看出：① 形变使 ZnS 类石墨烯的正有效电荷由 $Z_+ = 1.417$ 增大到 $Z'_+ = 4.658$ ，负有效电荷由 $Z_- = -5.676$ 变为 $Z'_- = -16.621$ ，形变对负电荷的影响大于正电荷；② 3 种形变中，大小形变和单轴形变对正、负有效电荷的影响最大，剪切形变的影响最小。

5 结 论

1) 在所讨论的温度范围内，ZnS 类石墨烯的热膨胀系数为负值，且随着温度的升高而数值增大，其数值在 $1.178 \times 10^{-3} - 22.323 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ 之间。简谐近似下的热膨胀系数为零；考虑非简谐项后，热膨胀系数随温度升高而变化。温度愈高，简谐与非简谐的值的差愈大。非简谐项中，第二非简谐项的影响极小；

2) 弹性模量随温度升高而增大，数值在 $0.241\ 405 \sim 453.253\ 5 \text{ GPa}$ 之间。温度低于 700 K 时变化很小，而温度高于 700 K 后则迅速增大；简谐近似下为常数；考虑非简谐项后则随温度升高而增大。温度愈高，非简谐效应愈显著；温度较低时第二非谐项的影响才明显；

3) 单轴形变不会引起 ZnS 类石墨烯有效电荷的变化，而大小形变引起的变化大于剪切形变。形变对负电荷的影响大于正电荷；大小、剪切、单轴形变这 3 种形变中，大小形变对正有效电荷和单轴形变对负有效电荷影响最大，剪切形变的影响最小。

4) 大小形变对极性的影响可达到 70.4%，剪切形变的影响仅为 46.5%。

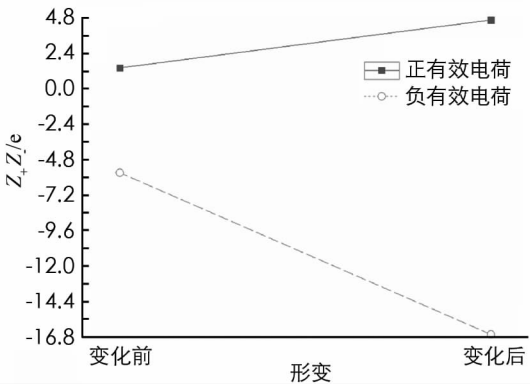


图 5 ZnS 类石墨烯有效电荷变化示意图

参考文献：

[1] 任荣康. ZnS 掺杂的第一性原理研究 [D]. 保定：河北大学，2017.

[2] 赵伟刚. ZnS 的 p 型掺杂及其光学性质的理论研究 [D]. 兰州：兰州理工大学，2017.

[3] 牛毅君. 不同元素掺杂 ZnS 系统的第一性原理研究 [D]. 新乡：河南师范大学，2014.

[4] ŞAHIN H, CAHANGIROV S, TOPSAKAL M, et al. Monolayer Honeycomb Structures of Group-IV Elements and III-V Binary Compounds: First-Principles Calculations [J]. Phys Rev B, 2009, 80(15): 155453-1-155453-12.

[5] TOPSAKAL M, CIRACI S. Elastic and Plastic Deformation of Graphene, Silicene, and Boron Nitride Honeycomb Nanoribbons Under Uniaxial Tension: A First-Principles Density-Functional Theory Study [J]. Phys Rev B, 2010, 81(2): 024107-1-024107-6.

- [6] ZHUANG H L, SINGH A K, HENNING R G. Computational Discovery of Single-Layer III-V Materials [J]. Phys Rev B, 2013, 87(16): 165415-1-165415-8.
- [7] SINGH A K, ZHUANG H L, HENNING R G. Ab Initio Synthesis of Single-Layer III-V Materials [J]. Phys Rev B, 2014, 89(24): 245431-1-245431-10.
- [8] DAVYDOV S Yu. Упругие и диэлектрические характеристики графеноподобных соединений AN-B8-N [J]. Физика и техника полупроводников, 2013, 47(8): 1065-1070.
- [9] DAVYDOV S Yu. Вклад π -связей в эффективные заряды, энергию когезии и силовые константы графеноподобных соединений [J]. Phys. SolidState, 2016, 58(2): 392-400.
- [10] DAVYDOV S Yu. О силовых константах графена[J]. Phys. SolidState, 2010, 52(9): 1815-1818.
- [11] 郑瑞伦, 胡先权. 大学物理面心立方晶体热力学非谐效应 [J]. 大学物理, 1994, 13(5): 15-18.
- [12] HARRISON W A. Theory of the Two-Center Bond [J]. Phys Rev B, 1983, 27(6): 3592-3604.
- [13] DAVYDOV S Yu. Упругие модули третьего порядка однослойного графена [J]. Phys. SolidState, 2011, 53(3): 617-619.
- [14] DAVYDOV S Yu. Оценки упругих характеристик графенов [J]. Phys Stat Sol, 2009, 51: 2041-2042.

On Thermal Expansion and Elastic Modulus and Effective Charge of ZnS Graphene

LONG Yi-xi^{1,2}, REN Xiao-xia¹, ZHANG Hao³

1. Engineering Research Center of New Energy Storage Devices and Applications for Universities in Chongqing/

Chongqing University of Arts and Sciences, Yongchuan Chongqing 402160, China;

2. School Of Mathematics and Finance, Chongqing University of Arts and Sciences, Yongchuan Chongqing 402160, China;

3. College of Materials and Chemical Engineering, Chongqing University of Arts and Sciences, Yongchuan Chongqing 402160, China

Abstract: Considering the deformation and the anharmonic vibration of the atoms, we have studied the temperature-dependence of the thermal expansion coefficient and the elastic modulus of ZnS graphene, the relationship between the effective charge and the polarity and the deformation by the solid physical method. We have discussed the effects of the deformation and the atomic anharmonic vibration on them. The results show that the thermal expansion coefficient of ZnS graphene is negative, and the value is between $1.1781.178 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ and 22.323×10^{-3} , which is increasing with temperature. The value of elastic modulus is between $0.241\ 405 - 453.253\ 5 \text{ GPa}$ increasing with temperature. In the consideration of the simple harmonic approximation, the thermal expansion coefficient is zero and the elastic modulus are constant. When the anharmonic term is considered, the thermal expansion coefficient and the modulus of elasticity vary with the temperature. The higher the temperature is, the more obvious the anharmonic effect is. Among the deformation shear, the shear deformation and uniaxial deformation, the size deformation has the greatest influence on the positive effective charge, the uniaxial deformation has the greatest influence on the negative effective charge, and the shear deformation has the least influence on the positive and negative effective charge. The influence of size deformation on polarity can reach 70.4%, while the effect of shear deformation is only 46.5%.

Key words: ZnS grapheme; thermal expansion; elastic modulus; effective charge; deformation; elastic deformation anharmonic effect