

二维范德瓦耳斯异质结 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ ($X = \text{Bi}, \text{Sb}$) 的光电性能*

熊祥杰¹⁾ 钟防¹⁾ 张资文¹⁾ 陈芳¹⁾ 罗婧澜²⁾
赵宇清^{1)†} 朱慧平^{3)‡} 蒋绍龙^{4)††}

1) (湖南科技大学物理与电子科学学院, 智能传感器与新型传感器材料湖南省重点实验室, 湘潭 411201)

2) (格拉斯哥大学亚当史密斯学院, 格拉斯哥 G128QQ)

3) (中国科学院微电子研究所, 硅器件技术重点实验室, 北京 100029)

4) (粤港澳大湾区(广东)量子科学中心, 深圳 518045)

(2024年3月26日收到; 2024年4月29日收到修改稿)

设计二维半导体范德瓦耳斯异质结是一种实现多功能微电子器件的有效策略. 本文构筑了二维钙钛矿 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ ($X = \text{Bi}, \text{Sb}$) 和钢锡 InSe 的范德瓦耳斯异质结 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$. 基于密度泛函理论的第一性原理方法, 计算了其几何、电子结构、光学性质. 研究表明, 二维 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 和 $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结为 II 型能带排列, 且带隙分别为 1.61 eV 和 1.19 eV, 可见光和紫外光范围内具有较高的吸收系数. 基于形变势理论和类氢原子模型的计算, 二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结显示了较高的电子迁移速率和激子结合能. 基于 II 型排列的能带结构和肖克利-奎伊瑟极限 (Shockley-Queisser limit), 对比研究了光电转换效率. 此外, 进一步探究了双轴应变对二维异质结 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 光电特性的调控及其规律. 上述研究为未来设计高效的二维范德瓦耳斯光电子器件提供了理论依据.

关键词: 二维异质结, 光电转换效率, 第一性原理计算, 应变工程

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 31.15.es, 71.35.Cc

DOI: 10.7498/aps.73.20240434

1 引言

太阳能电池是一种环保、可以将太阳辐射能量直接转化为电能的光伏器件, 为全球解决能源问题做出了巨大贡献^[1-5]. 目前太阳能电池商业化的主要障碍是缺乏高光电转换效率 (power conversion efficiency, PCE) 的材料. 过去几十年, 人们对新型光伏材料进行了高度密集的探索和研究^[6,7]. 特别

是近年来, 有机-无机杂化的铅卤钙钛矿 ABX_3 (A 为有机基团, B 为铅, X 为卤族元素), 因其长的载流子扩散度、高的载流子迁移率、可调的带隙和高的光吸收系数等优异性质而备受关注^[8-12]. 目前, 实验室已认证的 PCE 已突破 25%. 但有机-无机杂化的铅卤钙钛矿也面临着以下问题亟待解决: 毒性和不稳定性. 铅对人体有毒性, 会损害神经系统、消化系统和循环系统, 且 PbI_6 八面体结构在空气和水中易分解, 制约了其商业化应用^[13,14]. 因此,

* 国家自然科学基金 (批准号: 12204166)、湖南省自然科学基金 (批准号: 2024JJ5132)、国家重点研发项目 (批准号: 2023YFB3611700) 和湖南科技大学科研启动基金 (批准号: E51996) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yqzhao@hnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: zhuhui ping@ime.ac.cn

†† 通信作者. E-mail: jiangshaolong@quantumsc.cn

亟需寻找非铅且环境友好的高效光电太阳能电池材料, 以满足商业化的应用.

过去几年, 石墨烯, 过渡金属硫化物 (TMD)^[15], 过渡金属碳氮化物 (Mxenes), 二维钙钛矿^[16] 等二维材料的发现和制备, 不仅拓展了谷电子学、转角电子学、铁电和热释电^[17-19] 等研究, 也为探索高效稳定的光伏材料和器件提供了广泛平台^[20]. 相较于三维铅基钙钛矿, 二维钙钛矿具有更高的稳定性, 且通过把第 V 主族金属元素中与 Pb 原子具有相似的电子构型、电负性和离子半径的 Sb³⁺ 和 Bi³⁺ 作为其可替代元素^[21], 能降低其毒性. 其通式为 A₃X₂B₉ (其中 A 为一价阳离子, X 为三价阳离子, B 为卤化物阴离子), 在室温下具有优异的稳定性, 长的载流子扩散寿命和较高的光吸收系数^[22-24]. 因此, 基于 Bi 和 Sb 基的二维钙钛矿被认为是具有较高稳定性和较低毒性的光电材料^[25]. 稳定且无毒的二维非铅钙钛矿 Cs₃X₂I₉ (X = Bi, Sb) 已被用于高灵敏度光电探测器^[26]、高性能 X 射线探测器^[27-29]、发光器件^[30]、 α 粒子探测器^[31]、光催化剂^[32] 和超级电容器^[33]. 而多晶 Cs₃X₂I₉ 钙钛矿薄膜在存储器件^[34]、光电探测器^[35]、光电池电极^[36]、柔性光电突触场效应晶体管^[37] 和各种太阳能电池器件中得到了广泛应用. 此外, 二维硒化铟 (InSe) 具有较大光吸收系数、较高的载流子迁移速率、高的电流开关比和光的二向色性等性质, 目前已经在晶体管、高性能光电探测器和偏振光学调制器等中得到广泛的应用研究^[38]. 但由于 Cs₃X₂I₉ 和 InSe 具有较大的带隙, 导致了其光电转换效率较低^[39]. 而最近提出的基于二维范德瓦耳斯异质结 g-C₃N₄/TiO₂-B(100) 的能带工程已被用于设计高效的光伏和光催化材料^[40,41], 该策略为调控 Cs₃X₂I₉ 光电性能提供了新的思路.

因此, 由不同供体和受体构筑二维异质结构被认为是实现高效太阳能电池的有效途径^[42-44]. 而供体和受体的选择尤为重要, 无毒性、高载流子迁移率、良好的稳定性和较高的光吸收是必不可少的条件. 基于此, 本文选取具有较弱的层间范德瓦耳斯 (van der Waals, vdW) 作用的二维 Cs₃X₂I₉ (X = Bi, Sb)/InSe 构筑的范德瓦耳斯异质结为研究对象, 研究其光电特性. 电子结构显示, 二维钙钛矿异质结既保持了各组分的电子特性, 又能形成 II 型能带对齐, 有利于载流子的空间分离和界

面处的光吸收. 此外, 基于形变势理论和类氢原子模型, 分别研究了二维 Cs₃X₂I₉/InSe 异质结的载流子有效质量, 迁移速率和激子结合能. 另外, 基于 Shockley-Queisser limit 的方法预测了两种异质结的 PCE, 并采用双轴应力对上述特性进行了调控. 最后, 总结并分析了较低 PCE 源于较大的供体带隙和导带偏移量. 因此, 未来需进一步引入新的能带工程降低供体 Cs₃X₂I₉ 的能带带隙及供体和受体间的导带偏移从而提高 PCE.

2 计算方法

2.1 几何和电子结构

本文所有的计算是基于密度泛函理论 (density functional theory) 的第一性原理, 利用 VASP 软件包 (Vienna *ab initio* simulation package) 完成^[45]. 价电子和芯电子间的相互作用采用投影缀加平面波 (projected augmented wave) 赝势的方法描述. 采用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 下的 PBE (Perdu-Burke-Ernzerhof)^[46,47] 泛函描述电子间的交换关联能. 沿着 *c* 轴方向设置超过 15 Å (1 Å = 10⁻¹⁰ m) 的真空层厚度以屏蔽相邻原子层间的相互作用. 采用由 Steinmann 和 Corminboeuf^[48] 提出的 DFT-dDsC 色散校正方法来修正钙钛矿 Cs₃X₂I₉ 与 InSe 之间弱的层间相互作用. 所有计算中, 平面波截断能量设置为 500 eV. 采用布里渊区中的 3×3×1 *K* 点网格进行结构优化, 直到每个原子所受的力小于 0.01 eV/Å. 鉴于 PBE 泛函的计算方法常低估能带带隙, 本文中进一步采用杂化泛函 Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06)^[49] 的方法计算了电子结构和光学性质.

2.2 光学性质

采用了加密的 6×6×1 *K* 点网格计算光吸收系数, 计算公式如下^[50,51]:

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2}\omega \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2}, \quad (1)$$

其中 ω 为光的频率, ε_1 和 ε_2 分别为介电函数的实部和虚部.

2.3 载流子迁移速率

基于形变势 (deformation potentials, DP) 理

论对二维异质结构的载流子迁移速率 μ_{2D} 进行了研究, 计算公式如下^[52-54]:

$$\mu_{2D} = \frac{2e\hbar^3 C_{2D}}{3K_B T |m^*|^2 E_1^2}, \quad (2)$$

其中 \hbar 是约化普朗克常数, K_B 是玻尔兹曼常数, T 是温度, m^* 是有效质量, 其定义如下:

$$m^* = \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}^2} \right]^{-1}, \quad (3)$$

其中 \mathbf{k} 为波矢量, $\varepsilon(\mathbf{k})$ 表示带边的能量本征值.

E_1 是 DP 常数, 表示价带顶或导带底对应变的线性拟合, 计算公式如下:

$$E_1 = \frac{\partial E_{\text{edg}}}{\partial \delta}. \quad (4)$$

声子在 a 和 b 方向上传播引起的弹性模量 C_{2D} , 计算公式如下:

$$C_{2D} = \frac{\partial^2 E}{\partial \delta^2} \frac{1}{S_0}, \quad (5)$$

其中, E 为体系总能量, S_0 是优化后 xy 平面面积, δ 是施加的应变.

2.4 激子结合能

激子结合能 E_b 决定了电子-空穴对的复合率, 从而制约了载流子的扩散长度. 基于类氢原子模型, 计算公式如下^[55,56]:

$$E_b = \frac{m_e e^4}{2 \times (4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_r^*}{m_e} \frac{1}{\epsilon_\infty^2} \frac{1}{n^2}, \quad (6)$$

其中, m_e 和 m_h 分别表示电子和空穴的质量, m_r^* 表示激子的约化质量 ($1/m_r^* = 1/m_e + 1/m_h$), ϵ_∞ 是电子贡献的静态介电常数, $n = 1$ 表示激子处于基态.

2.5 光电转换效率

基于 Shockley-Queisser limit, 异质结太阳能电池的光电转换效率 PCE 可以基于以下公式计算^[3,4,57-59]:

$$\eta = \frac{0.65(E_g - \Delta E_c - 0.3) \int_{E_g}^{\infty} \frac{J_{\text{ph}}(\hbar\omega)}{\hbar\omega} d(\hbar\omega)}{\int_0^{\infty} J_{\text{ph}}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}, \quad (7)$$

其中 0.65 为能带填充因子, E_g 是供体带隙, ΔE_c 是导带偏移量, $(E_g - \Delta E_c - 0.3)$ 用于估计最大开路电压. $J_{\text{ph}}(\hbar\omega)$ 是光子能量 $\hbar\omega$ 时的 AM1.5 太阳光光子通量.

3 结果与讨论

3.1 几何和电子结构

图 1(a), (b) 分别为优化后的二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的原子结构的俯视图和侧视图, 粉色、绿色、深紫色、青色、棕色和紫色的球分别代表 In, Se, I, Cs, Sb 和 Bi 原子. 另外, 沿 c 轴方向设置了超过 15 Å 的真空层厚度以屏蔽相邻原子间的作用. 优化后, 二维 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 和 $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的晶格常数以及层间距分别为 $a = b = 8.34$ Å, $d = 3.71$ Å 和 $a = b = 8.30$ Å, $d = 3.77$ Å, a, b 晶轴夹角为 $\gamma = 120^\circ$, 如表 1 所列. 表明二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结是六角晶系. 补充材料图 S1 (online) 表明二维异质结外延生长的稳定.

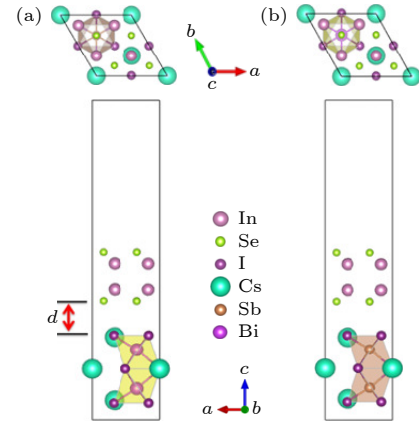


图 1 (a) $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 和 (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 的原子结构俯视图和侧视图, 其中 a 和 b 为晶格矢量, d 为 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ 层和 InSe 层之间的层间距离

Fig. 1. Top and side views of the atomic structures for the (a) $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructure, and (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructure, where a and b are the lattice vectors and d is the interlayer distance between the $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ and InSe layers.

表 1 二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的晶格常数 (a, b)、层间距离 (d)、激子结合能 (E_b)、带隙 (Gap) 和晶格失配比 (ϵ)

Table 1. Lattice constants (a, b), interlayer distances (d), exciton binding energy (E_b), band gap (Gap) and lattice mismatch ratio (ϵ) of 2D $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructures.

Heterostructure	Lattice/Å	$d/\text{Å}$	E_b/eV	Gap/eV	$\epsilon/\%$
$\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$	$a = 8.32$	3.71	0.79	1.61	1.89
	$b = 8.32$				
$\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$	$a = 8.30$	3.77	0.73	1.19	1.61
	$b = 8.30$				

图 2(a)–(c) 分别为基于 HSE06 泛函杂化的方法计算的二维 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$, $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9$ 和 InSe 的单体结构能带图, 结果显示二维 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$ 的带隙为 3.08 eV, 二维 $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9$ 的带隙为 2.60 eV, InSe 的带隙为 2.52 eV. 图 3(a), (b) 显示了采用 HSE06 泛函杂化计算的二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结沿着布里渊区中高对称点 $\Gamma(0\ 0\ 0) \rightarrow M(1/3\ 1/3\ 0) \rightarrow K(1/2\ 0\ 0) \rightarrow \Gamma(0\ 0\ 0)$ 闭合路径的投影能带. 能带结构表明二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结均为间接带隙, 价带顶 ($\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$) 和导带底 (InSe) 分别位于 K 和 Γ 点. 二维 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的带隙为 1.0 eV (PBE), 1.61 eV (HSE06), 二维 $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的带隙为 0.675 eV (PBE), 1.19 eV (HSE06). 更重要的是能带结构表明 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 是 II 型异

质结构, 这种能带结构保证了光生载流子在异质界面处的有效分离. 具体来说, 在异质界面, 光激发的电子直接从 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ 的价带顶跃迁到 InSe 的导带底. 而在异质结内部, 光激发的电子首先在 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ 中从价带顶移至导带底形成自由电子, 随后跃迁到 InSe 的导带底. 同时, 空穴从 InSe 的价带顶跃迁到 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ 的价带顶. 这种机制在空间上有效地分离了电子与空穴, 从而显著降低了电子与空穴的复合概率. 具体见图 3(c). 但它们具有间接带隙, 这导致产生光生载流子时需要吸收或释放声子, 声子主要提供跃迁所需的准动量以满足准动量守恒, 相比直接带隙中光生载流子的产生有更多的约束条件.

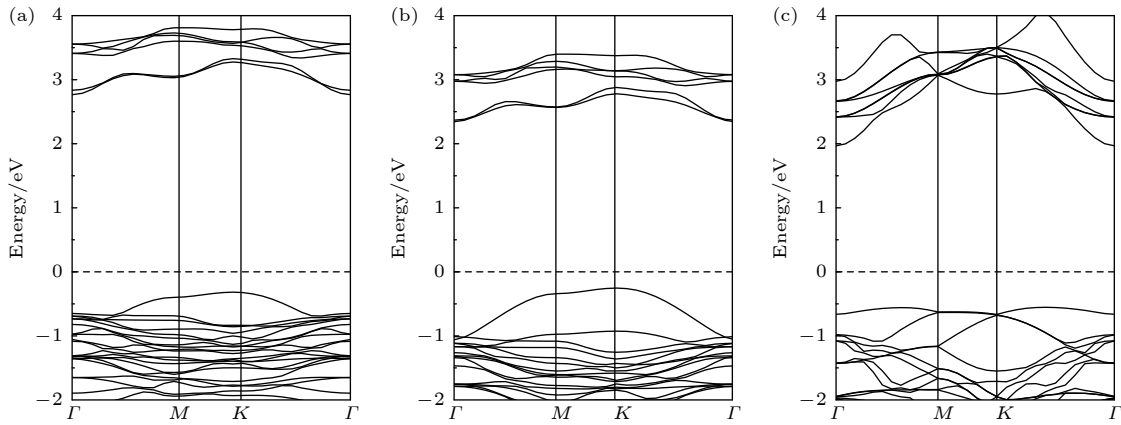


图 2 (a) $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$, (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9$ 和 (c) InSe 单体结构的 HSE06 能带结构

Fig. 2. Band structures of monolayer (a) $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$, (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9$ and (c) InSe .

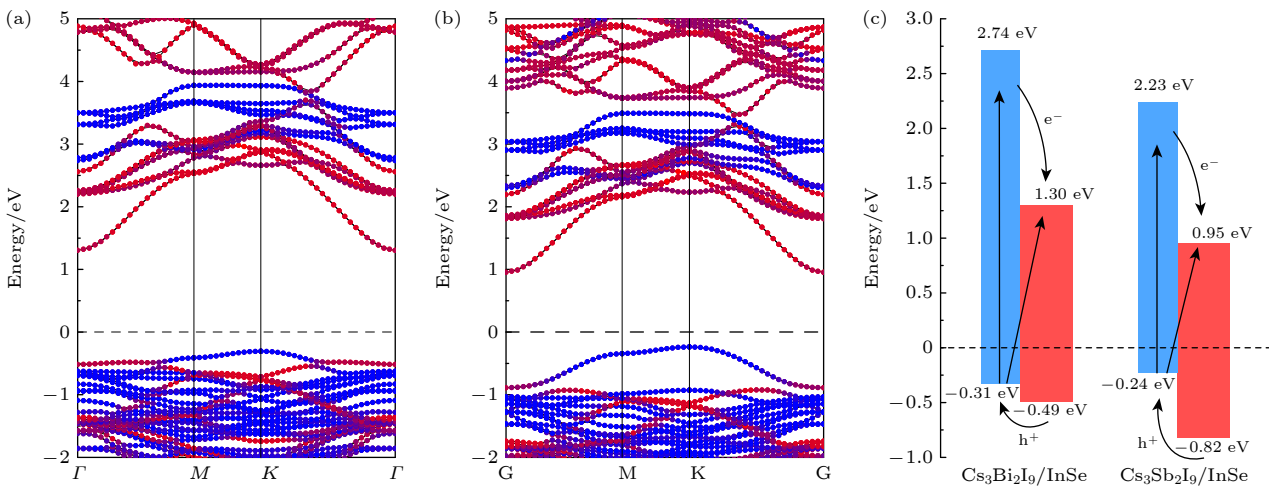


图 3 (a) $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 和 (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的能带结构; (c) $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的载流子迁移机制, 其中红色和蓝色分别代表 InSe 和 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ 的电子轨道贡献

Fig. 3. Band structures of (a) $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructure and (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructure; (c) carrier migration mechanisms in $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructures, the red and blue lines represent the electronic orbital contributions for InSe and $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$, respectively.

3.2 光学性质

光吸收系数是光电材料和器件的重要特性之一, 基于 (1) 式的 HSE06 方法计算并绘制了 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$, $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ 以及 InSe 结构的吸收光谱, 如图 4 所示. 结果显示二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结在能量 1.5—4.5 eV 范围的光吸收系数最高可达 $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$, 而单独的 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ 和 InSe 结构的光吸收系数最高仅达 $3 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. 上述结果显示, II 型的 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的光吸收系数在可见光范围内显著提高. 这种现象可能的原因是异质结构在界面处具有较为理想的带隙和层间相互作用,

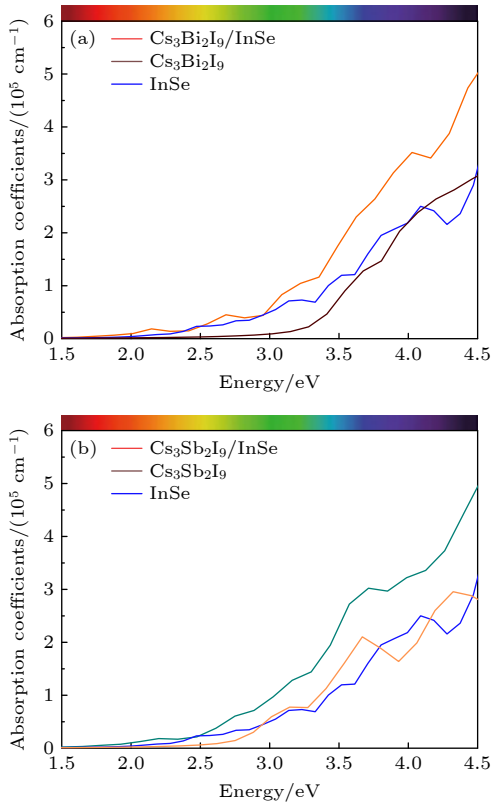


图 4 (a) 二维 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 和 (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结及其各自层在可见光谱中的光吸收系数

Fig. 4. Optical absorption coefficients of (a) 2D $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructure and (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructure and their respective layers in the visible spectrum.

表 2 300 K 下的电子和空穴沿 x 和 y 方向的有效质量 m (m_0)、DP 常数 E_1 (eV)、二维弹性模量 C_{2D} (N/m) 和载流子迁移率 μ_{2D} ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)

Table 2. Effective masses m (m_0), DP E_1 (eV), 2D modulus of elasticity C_{2D} (N/m) and carrier mobility μ_{2D} ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$) for electron and hole along and y directions at 300 K.

Carrier type		m_x	m_y	E_{1x}	E_{1y}	C_{2D_x}	C_{2D_y}	μ_{2D_x}	μ_{2D_y}
Electron	$\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$	0.22	0.23	8.62	8.62	122.96	122.96	472.80	425.55
	$\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$	0.24	0.22	7.13	7.13	125.76	123.22	619.99	692.30
Hole	$\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$	1.16	0.97	6.43	6.43	122.96	122.96	31.39	44.32
	$\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$	1.01	0.75	8.68	8.68	125.76	123.22	23.04	40.94

可以在重叠的电子态之间诱导新的光学跃迁. 二维 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 和 $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的吸收光谱分别在 3.1 eV 和 2.9 eV 后开始有显著的吸收, 吸收系数达到 10^5 cm^{-1} . $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$, $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$ 和 InSe 在 3.5—4eV 范围内出现了较小的吸收峰, 这与其电子态密度分布相关, 详见补充材料 S2, S3 (online). 红光范围内的光吸收系数很低, 这可能是限制其光电转换效率的重要因素之一. 由于二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结在紫外区的光吸收较为显著, 因此推测它们可能更适合作为紫外光电探测器.

3.3 载流子与激子

基于形变势理论对载流子迁移速率进行定量的分析. 基于 (3) 式, 将 PBE 方法得到的能带带边沿着 x 和 y 方向进行二阶拟合, 计算得到不同方向的电子和空穴有效质量 m^* . 基于 (4) 式, 将能带价带顶和导带底对沿着 x 和 y 方向的单轴应变进行线性拟合, 计算得到 DP 常数 E_1 . 基于 (5) 式, 根据体系总能量对 x 和 y 方向的单轴应变的二阶拟合, 计算得到弹性模量 C_{2D} 见补充材料图 S4, S5 (online). 二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的弹性模量是原子、离子或分子之间键强度的反应. 二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结沿 x 和 y 方向的弹性模量 C_{2D} 是各向同性的. DP 常数 E_1 表征了电子或空穴与声子之间耦合的强度, 其沿 x 和 y 方向也是各向同性的. 因为二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的电子和空穴有效质量 m^* 基本是各向同性的, 所以电子和空穴迁移速率均是各向同性. 上述计算数据在表 2 列出. 根据 (2) 式计算异质结的载流子迁移率, $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 的电子 (空穴) 迁移率沿着 x 和 y 方向分别是 $472.8(31.39)$ 和 $425.55(44.32) \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 的电子 (空穴) 迁移率沿着 x 和 y 方向分别是 $619.99(23.04)$ 和 $692.3(40.94) \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. 上述结果表明, 这两种异质结都是以电子传输为主型.

为了估计扩散长度和电子-空穴对复合率, 根据 (6) 式计算基态 ($n = 1$) 激子结合能 E_b . 用 PBE 方法计算的二维 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ ($\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$) 异质结的激子结合能 E_b 是 0.79(0.73) eV, 结果见表 1. 较大的激子结合能使电子空穴传输过程中容易发生复合, 是制约光电转换效率的重要因素之一.

3.4 应变工程

基于能带工程的外部应力是调控二维材料光电性能的有效手段. 在此, 研究了沿 x 和 y 方向的拉伸和压缩的双轴应变对二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的光电性能的调控. 各应变下的能带结构见补充材料图 S6, S7 (online). 图 5(a), (b) 显示了二维

$\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的能带结构对双轴应变的响应. 当施加 -5% 压缩应变到 +5% 拉伸应变作用于异质结构时, 随着压缩应变从 0 变化到 -5%, 能带带隙是逐渐增大, 随着拉伸应变从 0 变化到 +5%, 能带带隙逐渐减小. 当应用 +4% 拉伸双轴应力时, 二维 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的能带排列从 II 型转变成 I 型. 同时, 拉伸的双轴应变可以使 InSe 的导带底和价带顶相互靠近, 而 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ 的能带带隙少许降低. 结果表明, 受体 InSe 的能带对双轴应变的响应显著, 而供体 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ 的能带对双轴应变的响应不明显.

图 6(a), (b) 显示了二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的光吸收系数随双轴应变的变化关系. 值得注意的

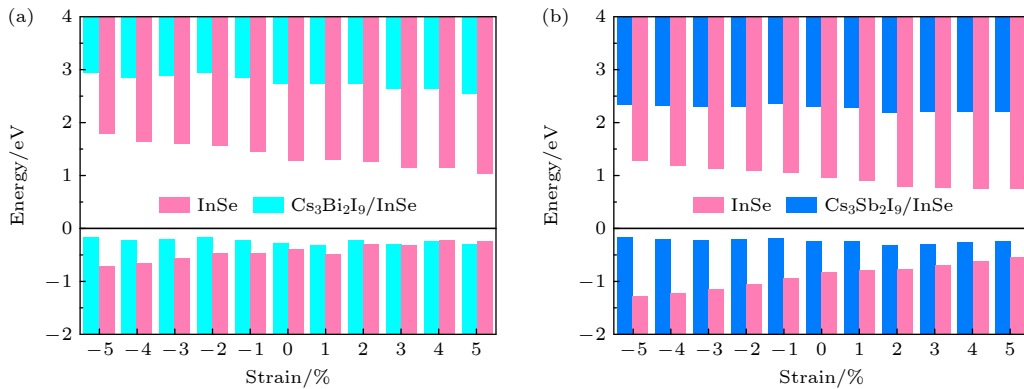


图 5 基于双轴应变的 (a) $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 和 (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ vdWHs 带边能量

Fig. 5. Biaxial strain-based (a) $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ and (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ vdWHs band edge energy.

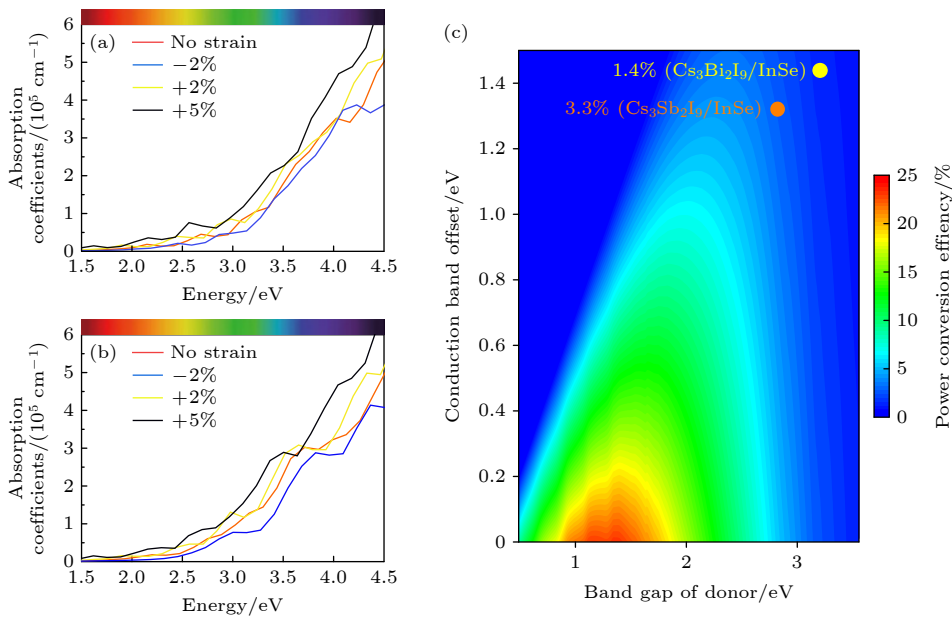


图 6 双轴应变对 (a) $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 和 (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ vdWHs 光吸收系数的调控; (c) $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 结构 PCE 图

Fig. 6. Biaxial strain on optical absorption coefficients of (a) $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ and (b) $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ vdWHs; (c) PCE map of intrinsic $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$.

是二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结在可见光区域的光吸收随着拉伸的双轴应变的增强, 有明显的提升, 从而改善对太阳光的响应. 基于 Shockley-Queisser limit (7) 式, 本文计算了二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结在 -5% — $+5\%$ 双轴应变下的 PCE. 如图 6(c) 所示. 结果显示, 本征的二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的效率约为 1.4%, 而在 -5% — $+5\%$ 双轴应力的调控下, 二维 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的 PCE 几乎没有变化; 在 -5% 双轴应变下, 二维 $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的 PCE 提升至 3.3%. 二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结低的 PCE 主要归于以下因素. 首先, 供体 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$ ($\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9$) 的带隙 3.1 eV (2.6 eV) 较大, 光照下难以获得大量的光生载流子. 其次, 受体与供体间的导带偏移量过大, 导致开路电压较小. 同时, 由于双轴应变并不能显著降低供体带隙和导带偏移量, 因此本文认为应变工程并不能使该材料应用于高效太阳能电池领域.

4 结 论

综上所述, 研究了二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的电子结构和光学性质. 计算结果显示, 二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结呈现 II 型能带排列, 其在可见光及紫外光区域内具有较高的光吸收系数, 其数量级超过 10^5 cm^{-1} . 基于形变势理论计算的二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的载流子迁移率基本是各向同性的, 电子和空穴的最高迁移速率分别为 6.9×10^3 和 $44 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. 显示这两种异质结属于电子传输为主型. 基于类氢原子模型计算的二维 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 和 $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结具有较大的激子结合能 0.79 和 0.73 eV. 较高的光吸收系数、载流子迁移率和激子能, 使二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结适用于光致发光器件. 然而基于 Shockley-Queisser limit 计算的二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的 PCE 仅为 1.4% 左右, 不适用于光伏太阳能领域. 低的 PCE 归因于较大的供体带隙和导带偏移. 此外, 基于双轴应变的二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的光电性质的调控显示, 拉伸的双轴应变能够提高光吸收系数, 但双轴应变并不能有效改善较大的供体带隙和导带偏移. 在 -5% 双轴应变下, 二维 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ 异质结的最高 PCE 仅达 3.3%. 因此, 实验和理论上亟需引入新的能带工程降低供体 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ 的能带带隙及供体和受体间的导带偏移从而提高 PCE.

数据可用性说明

本篇论文的关联数据可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00017> 中访问获取.

参考文献

- [1] Xue M, Jiang F Y, Qin F, Li Z F, Tong J H, Xiong S X, Meng W, Zhou Y H 2014 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **6** 22628
- [2] Gu S, Lin R, Han Q, Gao Y, Tan H, Zhu J 2020 *Adv. Mater.* **32** 1907392
- [3] Bernardi M, Palummo M, Grossman J C 2012 *ACS Nano* **6** 10082
- [4] Zhang D B, Hu S, Liu X, Chen Y Z, Xia Y D, Wang H, Wang H Y, Ni Y X 2021 *ACS Appl. Energy Mater.* **1** 357
- [5] Zhuang Q Y, Li J, He C Y, Yang T O, Zhang C X, Tang C, Zhong J X 2021 *Nanoscale Adv.* **3** 3643
- [6] Gray H B 2009 *Nat. Chem.* **1** 7
- [7] Lang Y F, Zou D F, Xu Y, Jiang S L, Zhao Y Q, Ang S Y 2024 *Appl. Phys. Lett.* **124** 052903
- [8] Jeong J, Kim M J, Seo J D, Lu H Z, Ahlawat P, Mishra A, Yang Y G, Hope M A, Eickemeyer F T, Kim M, Yoon Y J, Choi I W, Darwich B P, Choi S J, Jo Y, Lee J H, Walker B, Zakeeruddin S M, Emsley L, Rothlisberger U, Hagfeldt A, Kim D S, Grätzel M, Kim J Y 2021 *Nature* **592** 381
- [9] Chen L, Zhang L W, Chen Y S 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 028801 (in Chinese) [陈亮, 张利伟, 陈永升 2018 物理学报 **67** 028801]
- [10] Zhang Y, Zhou H P 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 158804 (in Chinese) [张钰, 周欢萍 2019 物理学报 **68** 158804]
- [11] Sun J C, Wu J, Tong X, Lin F, Wang Y A, Wang Z M 2018 *Adv. Sci.* **5** 1700780
- [12] Jiang Y, Xu T F, Du H Q, Rothmann M U, Yin Z W, Yuan Y, Xiang W C, Hu Z Y, Liang G J, Liu S Z, Nazeeruddin M K, Cheng Y N, Li W 2023 *Joule* **7** 2905
- [13] Tailor N K, Satapathi S 2020 *ACS Appl. Energy Mater.* **3** 11732
- [14] Yu Z L, Zhao Y Q, Wan Q, Liu B, Yang J L, Cai M Q 2020 *J. Phys. Condens. Matter.* **32** 205504
- [15] Zhang Z W, Liu Z S, Zhang J J, Sun B N, Zou D F, Nie G Z, Chen M Y, Zhao Y Q, Jiang S L 2023 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25** 9548
- [16] Liao C S, Ding Y F, Zhao Y Q, Cai M Q 2021 *Appl. Phys. Lett.* **119** 182903
- [17] Chen X K, Zhang E M, Wu D, Chen K Q 2023 *Phys. Rev. Applied* **19** 044052
- [18] Chen X K, Hu X Y, Jia P, Xie Z X, Liu J 2021 *Int. J. Mech. Sci.* **206** 106576
- [19] Chen X K, Zhang Y, Luo Q Q, Chen X, Jia P, Zhuo W X 2023 *Phys. Rev. B* **108** 235420
- [20] Sun B, Ding Y F, He P B, Zhao Y Q, Cai M Q 2021 *Phys. Rev. Applied* **16** 044003
- [21] Arfin H, Kshirsagar A S, Kaur J, Mondal B, Xia Z G, Chakraborty S, Nag A 2020 *Chem. Mater.* **32** 10267
- [22] Attique S, Ali N, Ali S, Khatoun R, Li N, Khesro A, Rauf S, Yang S K, Wu H Z 2020 *Adv. Sci.* **7** 1903143
- [23] Zeng M Y, Zhao Y Q, Cai M Q 2021 *Phys. Rev. Appl.* **16** 054019

- [24] Li J, Guo X Y, Hu X M, Wang W, Tai Y Y, Xie M, Zhi L, Zhang S L, Zeng H B 2023 *Appl. Surf. Sci.* **618** 156626
- [25] Jin Z X, Zhang Z, Xiu J W, Song H S, Gatti T, He Z B 2020 *J. Mater. Chem. A* **8** 16166
- [26] Li L J, Ye G, Luo T Y, Chen X Y, Zhang G J, Wu H, Yang L, Zhang W F, Chang H X 2022 *J. Phys. Chem. C* **126** 3646
- [27] Oh J M, Venters C C, Di C, Pinto A M, Wan L L, Younis I, Cai Z Q, Arai C, So B R, Duan J Q, Dreyfuss G 2020 *Nat. Commun.* **11** 1
- [28] Zhang J Y, Li A F, Li B H, Yang M M, Hao X, Wu L L, Zhao D W, Xia G P, Ren Z F, Tian W B, Yang D Y, Zhang J Q 2022 *ACS Photonics* **9** 641
- [29] Li A F, Yang M M, Tang P, Hao X, Wu L L, Tian W B, Yang D Y, Zhang J Q 2023 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **15** 23390
- [30] Zhang H J, Xu Y D, Sun Q H, Dong J P, Lu Y F, Zhang B B, Jie W Q 2018 *Cryst. Eng. Comm.* **20** 4935
- [31] McCall K M, Liu Z F, Trimarchi G, Stoumpos C C, Lin W W, He Y H, Hadar I, Kanatzidis M G, Wessels B W 2018 *ACS Photonics* **5** 3748
- [32] Bresolin B M, Balayeva N O, Granone L I, Dillert R, Bahnemann D W, Sillanpaa M 2020 *Sol. Energy Mater. Sol. C.* **204** 110214
- [33] Adams K, Malloys J, Li T Y, Kampouris D, Thijssen J B J, Robertson N 2019 *J. Phys. Energy* **1** 034001
- [34] Cuhadar C, Kim S G, Yang J M, Seo J Y, Lee D, Park N G 2018 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **10** 29741
- [35] Hussain A A 2020 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** 46317
- [36] Tewari N, Shivarudraiah S B, Halpert J E 2021 *Nano Lett.* **21** 5578
- [37] Li Y, Wang J H, Shen G Z 2022 *Adv. Sci.* **9** 2202123
- [38] Yu Z L, Jia Y T, Lang L, Sun X X, Zou Z J, Li F, Zhao Y Q, Liu B, Li C, Liao G H 2023 *J. Phys. : Condens. Matter* **35** 145501
- [39] Guo R, Wei X, Cao M Y, Zhang Y, Yang Y, Fan J B, Liu J, Tian Y, Zhao Z K, Duan L 2022 *Acta Chim. Sinica* **80** 526 (in Chinese) [郭瑞, 魏星, 曹末云, 张妍, 杨云, 樊继斌, 刘剑, 田野, 赵泽坤, 段理 2022 化学学报 **80** 526]
- [40] Yuan X J, Liu X J 2022 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24** 17703
- [41] Yuan X J, Tang S H, Qiu S, Liu X J 2023 *J. Phys. Chem. C* **127** 1828
- [42] Yu B B, Liao M, Yang J X, Chen W, Zhu Y D, Zhang X S, Duan T, Yao W T, Wei S H, He Z B 2019 *J. Mater. Chem. A* **7** 8818
- [43] Zhao Y Q, Liu Z S, Nie G Z, Zhu Z H, Chai Y F, Wang J N, Cai M Q, Jiang S L 2021 *Appl. Phys. Lett.* **118** 173104
- [44] Zhao Y Q, Xu Y, Zou D F, Wang J N, Xie G F, Liu B, Cai M Q, Jiang S L 2020 *J. Phys. : Condens. Matter* **32** 195501
- [45] Sun G, Kutri J, Rajczy P, Kertesz M, Hafner J, Kresse G 2003 *J. Molecular Structure: Theochem.* **624** 37
- [46] Perdew J P, Burke K, Wang Y 1996 *Phys. Rev. B* **54** 16533
- [47] Ernzerhof M, Perdew J P 1998 *J. Chem. Phys.* **109** 3313
- [48] Steinmann S N, Corminboeuf C 2011 *J. Chem. Phys.* **134** 044117
- [49] Xia C X, Du J, Huang X W, Xiao X B, Xiong W Q, Wang T X, Wei Z M, Jia Y, Shi J J, Li J B 2018 *Phys. Rev. B* **97** 115416
- [50] Gajdos G, Hummer K, Kresse G, Furthmuller J, Bechstedt F 2006 *Phys. Rev. B* **73** 045112
- [51] Sun S S, Meng F C, Wang H Y, Wang H, Ni Y X 2018 *J. Mater. Chem. A* **6** 11890
- [52] Cai Y Q, Zhang G, Zhang Y W 2014 *J. Am. Chem. Soc.* **136** 6269
- [53] Dong S, Li Y C 2021 *Phys. Rev. B* **104** 085133
- [54] Zhong F, Nie G Z, Lang Y F, Zhang Z W, Li H L, Gan L F, Xu Y, Zhao Y Q 2023 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25** 3175
- [55] Choi J H, Cui P, Lan H P, Zhang Z Y 2015 *Phys. Rev. Letters* **115** 066403
- [56] Jiang D S 2005 *Physics*. **34** 521 (in Chinese) [江德生 2005 物理 **34** 521]
- [57] Sun P P, Li Q S, Feng S, Li Z S 2016 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** 14408
- [58] Zhou L J, Zhang Y F, Wu L M 2013 *Nano Lett.* **13** 5431
- [59] Hu W, Lin L, Zhang R Q, Yang C, Yang J L 2017 *J. Am. Chem. Soc.* **139** 15429

Photovoltaic properties of two-dimensional van der Waals heterostructure $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ ($X = \text{Bi}, \text{Sb}$)^{*}

Xiong Xiang-Jie¹⁾ Zhong Fang¹⁾ Zhang Zi-Wen¹⁾ Chen Fang¹⁾
Luo Jing-Lan²⁾ Zhao Yu-Qing^{1)†} Zhu Hui-Ping^{3)‡} Jiang Shao-Long^{4)††}

1) (*Hunan Provincial Key Laboratory of Intelligent Sensors and New Sensor Materials, School of Physics and Electronics Science, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan 411201, China*)

2) (*Adam Smith School, University of Glasgow, Glasgow G128QQ, UK*)

3) (*Key Laboratory of Science and Technology on Silicon Devices, Institute of Microelectronics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China*)

4) (*Quantum Science Center of Guangdong-Hong Kong-Macao Greater Bay Area (Guangdong), Shenzhen 518045, China*)

(Received 26 March 2024; revised manuscript received 29 April 2024)

Abstract

Two-dimensional semiconductor heterostructures have excellent physical properties such as high light absorption coefficients, large diffusion lengths, high carrier mobility rates, and tunable energy band structures, which have great potential in the field of optoelectronic devices. Therefore, designing two-dimensional (2D) semiconductor van der Waals heterostructures is an effective strategy for realizing multifunctional microelectronic devices. In this work, the 2D van der Waals heterostructure $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ of non-lead Perovskite $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9$ and indium-tin InSe is constructed to avoid the toxicity and stability problems of lead-based Perovskites. The geometry, electronic structure, and optical properties are calculated based on the first-principles approach of density-functional theory. It is shown that the 2D $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ and $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructures are of type-II energy band arrangement and have band gaps of 1.61 eV and 1.19 eV, respectively, with high absorption coefficients in the visible range and UV range reaching to $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. The calculation results from the deformation potential theory and the hydrogen-like atom model show that the 2D $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructure has a high exciton binding energy (~ 0.7 eV) and electron mobility rate ($\sim 700 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$). The higher light absorption coefficient, carrier mobility, and exciton energy make the 2D $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructures suitable for photoluminescent devices. However, the energy band structure based on the Shockley-Queisser limit and type-II arrangement shows that the intrinsic photoelectric conversion efficiency (PCE) of the 2D $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructure is only about 1.4%, which is not suitable for photovoltaic solar energy. In addition, the modulation and its effect of biaxial strain on the photovoltaic properties of 2D $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructures are further investigated. The results show that biaxial strain can improve the visible absorption coefficient of 2D $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ heterostructure, but cannot effectively improve its energy band structure, and the PCE only increases to 3.3% at -5% biaxial strain. The above study provides a theoretical basis for designing efficient 2D van der Waals optoelectronic devices in future.

Keywords: 2D heterostructures, photoelectric conversion efficiency, first-principles calculations, strain engineering

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 31.15.es, 71.35.Cc

DOI: [10.7498/aps.73.20240434](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240434)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12204166), the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 2024JJ5132), the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2023YFB3611700), and the Initial Scientific Research Fund of Hunan University of Science and Technology, China (Grant No. E51996).

† Corresponding author. E-mail: yqzhao@hnu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zhuhuiping@ime.ac.cn

†† Corresponding author. E-mail: jiangshaolong@quantumsc.cn

二维范德瓦耳斯异质结 $Cs_3X_2I_9/InSe$ ($X = Bi, Sb$)的光电性能

熊祥杰 钟防 张资文 陈芳 罗婧澜 赵宇清 朱慧平 蒋绍龙

Photovoltaic properties of two-dimensional van der Waals heterostructure $Cs_3X_2I_9/InSe$ ($X = Bi, Sb$)

Xiong Xiang-Jie Zhong Fang Zhang Zi-Wen Chen Fang Luo Jing-Lan Zhao Yu-Qing Zhu Hui-Ping
Jiang Shao-Long

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 137101 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240434

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240434>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

二维 Nb_2SiTe_4 基化合物稳定性、电子结构和光学性质的第一性原理研究

First-principles study of stability, electronic and optical properties of two-dimensional Nb_2SiTe_4 -based materials

物理学报. 2020, 69(19): 197102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200848>

钙钛矿 $CsPbX_3$ ($X=Cl, Br, I$)与五环石墨烯范德瓦耳斯异质结的界面相互作用和光电性能的第一性原理研究

First principle calculations of interface interactions and photoelectric properties of perovskite $CsPbX_3$ ($X=Cl, Br, I$) and penta-graphene van der Waals heterostructures

物理学报. 2021, 70(5): 056301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201246>

范德瓦耳斯材料的原位应变工程与应用

In-situ strain engineering and applications of van der Waals materials

物理学报. 2024, 73(11): 110701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240353>

CuBiI三元化合物晶体结构预测及光电性能第一性原理研究

Structure prediction of CuBiI ternary compound and first-principles study of photoelectric properties

物理学报. 2021, 70(20): 207305 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210145>

二维平面和范德瓦耳斯异质结的可控制备与光电应用

Controllable preparation and photoelectric applications of two-dimensional in-plane and van der Waals heterostructures

物理学报. 2021, 70(2): 027901 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201419>

二维材料 XTe_2 ($X = Pd, Pt$)热电性能的第一性原理计算

Thermoelectric transport properties of two-dimensional materials XTe_2 ($X = Pd, Pt$) via first-principles calculations

物理学报. 2021, 70(11): 116301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201939>