

基于应变梯度的单层 Janus STe_2 能带与各向异性电子热输运的调控*

赵书磊¹⁾ 陈佩瑶¹⁾ 徐光羲¹⁾ 陈许敏^{1)†} 霍德璇²⁾¹⁾ (杭州电子科技大学理学院, 杭州 310018)²⁾ (杭州电子科技大学材料与环境工程学院, 杭州 310018)

(2026 年 2 月 8 日收到; 2026 年 3 月 12 日收到修改稿)

Janus STe_2 因打破面外镜像对称性而具有固有偶极矩, 并展现出优异的稳定性、光电及热学性质. 对其能带结构与各向异性电子热输运性能的有效调控, 是实现其在光电转换、自旋电子器件及信息存储领域应用的关键. 本文采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 在单层 Janus STe_2 中构建了扶手椅型、锯齿型和皱纹型构型以引入应变梯度, 分析了其能带结构、电荷转移路径及电子热导率各向异性的多维度协同调控规律. 研究发现, 3 种褶皱构型均能驱动 Janus STe_2 的带隙随振幅增大而逐渐闭合, 最终实现从半导体到金属的相变, 其中皱纹型褶皱展现出最高的调控效率, 在褶皱振幅 $0.6 \text{ \AA}$ 下即可触发相变, 这主要归因于应变梯度诱导的 Te-5p 轨道主导的电荷重分布以及 S-Te 键共价性的增强. 在热输运方面, 应变梯度使 Janus STe_2 的电子热导率实现了约两个数量级的提升, 且输运性能演化高度依赖于重构的方向性: 扶手椅型构型展现出最为显著的输运各向异性, 成功构建了高效的定向散热通道, 而皱纹型构型则提供了高效的全向散热途径. 本研究不仅深入阐明了多维应变梯度下 Janus STe_2 电子与热输运性能的协同演化规律, 揭示了从微观成键到宏观输运性能的一致性响应, 更为精准调控二维材料的能带结构与各向异性热输运提供了一种全新的理论路径, 为开发定向散热的柔性微纳电子器件以及设计面向下一代柔性电子、高效散热及多功能热电集成的微纳器件提供了关键理论依据.

关键词: Janus STe_2 , 应变梯度, 能带重构, 电子热导率**DOI:** 10.7498/aps.75.20260220**CSTR:** 32037.14.aps.75.20260220

1 引言

Janus 二维材料因其独特的破缺镜像对称性, 可以诱导出丰富的物理效应, 如本征面外极化场^[1,2]、可调带隙^[3,4]及轨道选择性响应^[5]等, 在高效光电转换、自旋电子器件及信息存储领域展现出巨大的应用潜力^[6,7]. 因此, Janus 二维材料已成为凝聚态物理与新型功能材料领域的研究热点^[2]. Janus 过渡金属硫族化合物 (transition metal dichalcogenides, TMDs) 不仅具有原子级厚度与结构稳定性^[8], 而且其电子态与晶格动力学对外部应力场展现出极

高的敏感性^[9,10], 为在原子尺度下探索电子与热输运性能的协同调控提供了理想的物理平台.

如何突破 Janus 材料固有物理特性的限制并实现性能的多维度精准调控是重要研究内容. 电场与光场已被证实可有效调控电子-声子耦合及能谷自由度, 展现出外场对电子结构的调控能力^[11,12]; 缺陷工程与化学掺杂方法可系统性调节过渡金属硫族化合物的载流子浓度与迁移率, 为电子输运优化提供了有效途径^[13]; 构建 Janus MoSSe/GaN 等范德瓦耳斯异质结, 则可通过界面能带工程调控内建电场与电荷分离效率, 从而提升光催化性能^[14]. 然而, 电场调控通常高度依赖电极接触且存在显著

* 国家自然科学基金 (批准号: 11874011) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: 41790@hdu.edu.cn

的能量消耗问题, 而化学修饰则易破坏材料的结构完整性. 褶皱结构通过引入空间连续变化的非均匀应变场, 即应变梯度, 提供了一种非破坏性的调控手段. 应变梯度无需改变材料组分, 可以实现能带结构^[15]、载流子行为^[16,17]及声子输运的深度耦合^[8,18]与协同设计^[19]. 通过机械弯曲产生的曲率效应可实现对单层 MoS_2 材料费米能级移动与电荷局域化的有效控制^[20]. 在单层 WSe_2 中, 褶皱结构可诱导半导体-金属转变, 且该转变与褶皱高度和晶格取向密切相关, 在调控二维材料性能方面的重要潜力^[21]. 实验上已发展出机械剥离^[22]、化学气相沉积^[23]、液相剥离^[24]及外力诱导^[25]等多种褶皱制备技术. 目前, 针对应变梯度对单层 Janus STe_2 的电子结构与热输运性能的协同调控机制, 相关研究仍较为匮乏. 应变梯度对 Janus 材料电热输运性能的构效关系及其内在物理机制, 同样是值得深入研究的问题.

本文采用第一性原理计算方法, 系统研究了单层 Janus STe_2 扶手椅型褶皱 (Armchair ripple)、锯齿型褶皱 (Zigzag ripple) 与皱纹型褶皱 (Wrinkles) 3 种褶皱构型下的电子结构与热输运行为. 通过深入剖析应变梯度对能带重构、电荷转移路径及电子热导率各向异性的调控机制, 旨在阐明多维应变梯度下 Janus STe_2 电子与热输运性能的协同演化规

律. 研究涵盖了褶皱构型演化、半导体-金属转变、电荷局域化微观机理以及热导率各向异性增强等核心内容, 为设计高性能、柔性可调的微纳电子及热电器件提供理论依据.

2 计算方法

计算采用基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT)^[26] 第一性原理计算的 VASP (Vienna *ab initio* simulation package)^[27] 软件包. 电子-离子交换关联作用采用投影缀加平面波方法结合 (Perdew-Burke-Ernzerhofer, PBE) 泛函进行描述^[28], 平面波基组截断能设为 500 eV. 几何优化与电子结构计算过程中, 自洽场迭代的能量收敛标准为 10^{-5} eV, 原子间作用力收敛标准为 0.01 eV/Å. 在几何优化和电子结构计算中, 布里渊区 k 点采样采用 $4 \times 8 \times 1$ 的 Monkhorst-Pack 网格^[29], 并在垂直于二维材料平面的方向设置 20 Å 的真空层, 以消除周期性边界条件可能带来的镜像相互作用.

3 结果与讨论

3.1 结构模型

本文以 $6 \times 6 \times 1$ 的单层 Janus STe_2 超胞为研究对象, 其结构如图 1(a) 所示. 优化后的晶格常

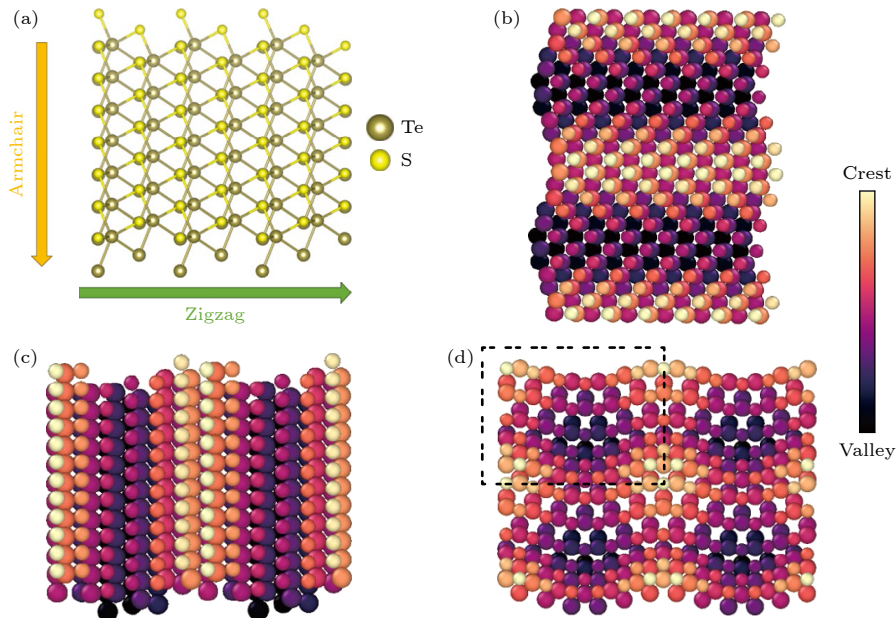


图 1 Janus STe_2 的 $6 \times 6 \times 1$ 超胞本征和褶皱模型, 颜色渐变表示褶皱幅度 (a) 本征结构; (b) 扶手椅型褶皱; (c) 锯齿型褶皱; (d) 皱纹型褶皱

Fig. 1. The intrinsic and corrugated $6 \times 6 \times 1$ supercell of Janus STe_2 , the color gradient represents the wrinkle amplitude: (a) Pristine flat structure; (b) Armchair ripple; (c) Zigzag ripple; (d) Wrinkles.

数 $a = b = 3.85 \text{ \AA}$, S—Te 键长与 Te—Te 键长分别为 $2.76 \text{ \AA}$ 和 $3.03 \text{ \AA}$, 计算结果与文献 [19,26] 的理论值相符. 在 Janus STe_2 结构的基础上利用位移函数 [30] 引入几何形变, 建立了相应的褶皱模型:

$$Z = A_1 \cos\left(\frac{2\pi x}{H_x}\right) + A_2 \cos\left(\frac{2\pi y}{H_y}\right), \quad (1)$$

式中, A_1, A_2 为褶皱振幅, 单位为 $\text{\AA}$, 其量值决定了褶皱形貌的显著程度. H_x 和 H_y 代表超胞的长度, 分别为 $H_x = 23.08 \text{ \AA}$, $H_y = 20.24 \text{ \AA}$, x 和 y 为超胞内各原子的坐标. 仅存在 A_1 时, 对应的结构被定义为扶手椅型褶皱, 如图 1(b) 所示; 仅存在 A_2 时, 对应的结构被定义为锯齿型褶皱结构, 如图 1(c) 所示; 当 A_1 与 A_2 同时存在时, 则形成图 1(d) 的皱纹型褶皱结构, 皱纹型构型实际计算基于黑色虚线框所示的超胞单元进行, 该单元足以捕捉应变梯度诱导的本征物理特性, 并满足周期性边界条件的要求.

3.2 结构稳定性分析

结构的力学稳定性是研究其物理性质的前提. 已有研究表明, 波纹结构的能量与振幅之间遵循一阶简谐振动模型, 即 $E = \frac{1}{2}\kappa A^2$ [31,32]. 在该理论框架下, κ 为弹性系数, 体系总能 E 与褶皱振幅 A 之间存在二次函数关系 $E \propto A^2$, 这是小振幅下弹性应变阶段的典型特征, 意味着形变是完全弹性且可逆的, 结构保持了力学稳定性. 为验证本文所构建的褶皱模型是否处于稳定形变区间, 我们系统分析了体系总能随褶皱振幅的演化规律. 如图 2 所示, 3 种褶皱构型的能量与振幅数据的拟合, R^2 值均高于 0.99. 结果表明, 本文的褶皱振幅均处于弹性安全区间内, 排除了结构断裂或动力学不稳定的干扰, 从而确保了后续关于应变梯度诱导电子结构跃

迁及热输运规律研究的物理真实性.

3.3 应变梯度调控单层 Janus STe_2 的能带结构

3 种褶皱模型在不同褶皱振幅下的能带结构如图 3 所示. 本征 Janus STe_2 为间接带隙半导体, 带隙值为 0.74 eV , 与文献 [26] 报道吻合较好. 图 3(a) 展示了扶手椅型的振幅 A_1 从 0 增至 $0.6 \text{ \AA}$ 时, 带隙从 0.74 eV 降至 0.125 eV , A_1 为 $0.8 \text{ \AA}$ 时, 带隙完全闭合, 转变为金属态. 锯齿型的振幅 A_2 在相同应变范围内, 锯齿型导致带隙从 0.74 eV 减至 0.064 eV 并最终完全闭合, 材料也转变为金属态, 如图 3(b) 所示. 在图 3(c) 皱纹型的图中, 当 A_1 和 A_2 同时从 $0.2 \text{ \AA}$ 增大至 $0.6 \text{ \AA}$ 时, 实现了半导体到金属的相变. 因此, 皱纹型褶皱的带隙闭合效率最高, 扶手椅型与锯齿型则相对较低.

为了从电子结构层面进一步探究不同褶皱构型调控效率差异的原因, 附录 A 图 A1 展示了 3 种结构在不同褶皱振幅下的总态密度 (TDOS). TDOS 分析表明, 随褶皱振幅增加, 3 种构型的价带顶 (VBM) 与导带底 (CBM) 逐渐向费米能级靠拢, 表现为 TDOS 带边峰的连续移动与带隙区域的收缩, 皱纹型褶皱展现出最高的能隙闭合效率. 图 4(a)—(c) 给出了 3 种结构在不同褶皱振幅下的 S-3p, Te-5p 轨道的投影分波态密度 (PDOS). 在导带区域, Te-5p 轨道对 CBM 的贡献占据主导地位. 随着褶皱振幅的增大, 应变梯度诱导的晶格畸变, 特别是压缩区域内 Te—Te 键长的缩短和键角的改变, 显著增强了 Te 原子间 p 轨道电子云的重叠与相互作用. 这种增强的相互作用导致 Te-5p 反键轨道的能量被有效压制, 使其向费米能级 E_F 靠近.

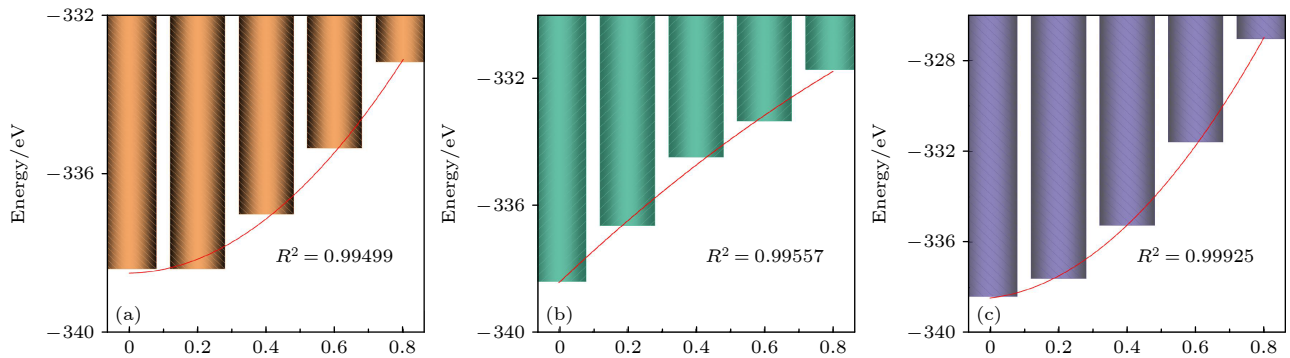


图 2 不同褶皱结构的能量数值拟合 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型; (c) 皱纹型

Fig. 2. Numerical fitting of energy for evolution of ripple configurations: (a) Armchair ripple; (b) Zigzag ripple; (c) Wrinkles.

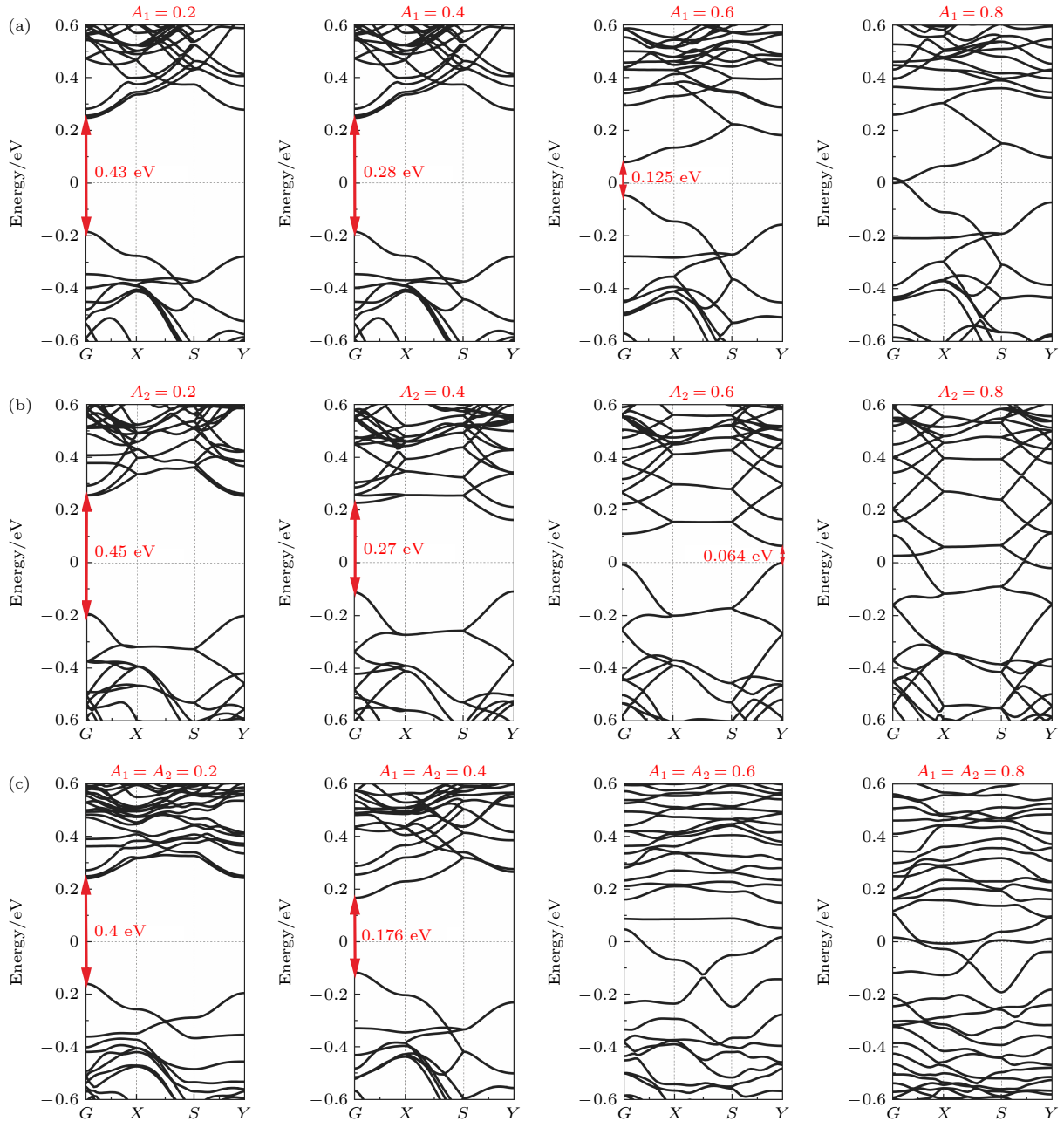


图3 不同褶皱构型下能带结构 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型; (c) 皱纹型

Fig. 3. Band structure evolution of ripple configurations: (a) Armchair ripple; (b) Zigzag ripple; (c) Wrinkles.

同时, Te-5p 主导的峰值逐渐减小并显著展宽, 体现了微观上电子态从定域性向离域性转变的直接体现. 在应变梯度作用下, Te 原子周围的势场发生变化, 电子波函数在空间上的扩展性增强, 使得电子不再局限于特定的 Te 原子或键, 而能在更广阔的晶格范围内自由运动, 从而促进了电子的离域化, 为后续的金属化转变奠定了电子结构基础. 在 3 种构型中, 皱纹型褶皱构型下 Te-5p 峰向费米能级靠近的趋势最为明显, 且峰值减小和展宽的程度也最为显著, 这与该构型在较低振幅下即可触发半

导体-金属转变的结论高度吻合, 表明不同的应变梯度分布对 Te 原子的局域环境和轨道杂化产生了差异化的影响, 其中褶皱型构型在促进电子离域化和能带弥散化方面表现出更高的效率. 另一方面, 在价 VBM 附近, S-3p 和 Te-5p 轨道均有显著贡献, 且 S-3p 轨道主导杂化. 随着应变梯度的加剧, 应变诱导的原子位移和键合环境变化, 导致 S—Te 键的极性与强度发生微调, 进而影响 S-3p 和 Te-5p 轨道间的杂化强度. 这种微观键合环境的改变, 使得 S-3p 轨道主导的价带向更深的能量方向移动.

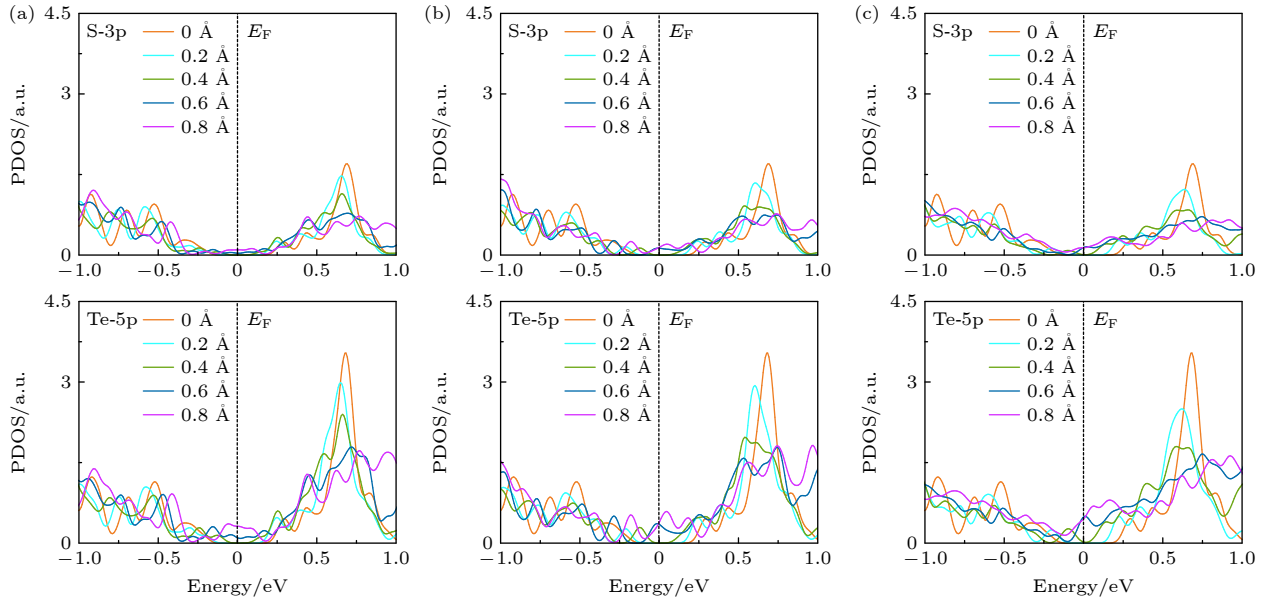


图 4 不同褶皱构型下分波态密度 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型; (c) 皱纹型

Fig. 4. PDOS of ripple configurations: (a) Armchair ripple; (b) Zigzag ripple; (c) Wrinkles.

CBM 和 VBM 的这种非对称偏移, 以及 PDOS 峰值的变化, 共同揭示了应变梯度通过重新调制材料内部的内建电场, 并增强 S-Te-Te 原子间的轨道杂化, 从而深刻改变了 Janus STe_2 的电子结构当能级演化在从扶手椅型、锯齿型到皱纹型构型的切换过程中愈发显著, 定量地揭示了应变梯度对轨道杂化程度的强力调控。

3.4 应变梯度诱导的电荷定向迁移与成键机制

为深入探究上述能带与态密度变化的微观机理, 本文计算了电子密度差 (electron density difference, EDD) 和电子局域函数 (electron localization function, ELF) 系统分析了应变梯度作用下的电荷转移路径与化学键重构行为。图 5 展示了 3 种褶皱构型在不同振幅下的差分电荷密度分布, 黄色和青色区域分别对应电荷的积聚与耗尽, 反映了电子从压缩区向拉伸区的迁移过程。该差分电荷密度依据如下公式进行定义:

$$\Delta\rho = \rho_{\text{Strain}} - \rho_0, \quad (2)$$

其中 ρ_{Strain} 代表应变体系的电荷密度, ρ_0 为未应变体系的电荷密度。黄色区域与青色区域随褶皱的几何形变呈现出明显的空间周期性分布, 3 种构型均表现出随振幅增大而增强的趋势。图 5(a) 扶手椅型与图 5(b) 锯齿型构型的电荷重分布过程较为温

和, 且具有较好的空间对称性。图 5(c) 皱纹型构型展现出更高的应变灵敏度, 青色区域的色调深度随振幅增大呈剧烈非线性加深, 反映了该结构在形变过程中更强的电子重排效应黄色积聚区在拉伸部位表现得更为集中。这种空间分布揭示了电荷的定向转移路径。随着褶皱振幅的逐步增大, 压缩区的电子耗尽程度持续深化, 反映了电子转移量的增大。应变梯度成功驱动了模型中键长的非均匀变化, 进一步主导了电荷的重分布过程, 压缩区因原子间距减小导致电子云排斥增强, 迫使电子向势能较低的拉伸区扩散。

为进一步揭示该结构调控电子特性的微观物理机制, 本研究引入电子局域函数分析, 从空间成键特征的角度探讨应变对局域电子行为的影响。图 6 展示了单层 Janus STe_2 在不同晶向 ($[100]$, $[010]$ 及 $[001]$) 的 ELF 分布。图 6(a) 所示的本征结构中, 沿 $[010]$ 与 $[100]$ 方向的侧视图一致显示, S 原子层的 ELF 强度显著高于 Te 原子层, 呈现出更强的电子局域性, 这归因于 S 原子较强的电负性对价电子的束缚作用。在 $[001]$ 面上, S 层与 Te 层之间形成了连续的网格状绿色连通区域, 该网络源于 S-3p 与 Te-5p 轨道在面内的广泛杂化与重叠, 构成了材料面内电荷传输的本征离域通道。图 6(b) 显示, 在扶手椅型褶皱中, 表现出较为均匀应变响应。 $[100]$ 与 $[010]$ 方向视图均显示电子云整体沿面外方向发生偏移, 反映了电荷从 S 原子层向 Te 层

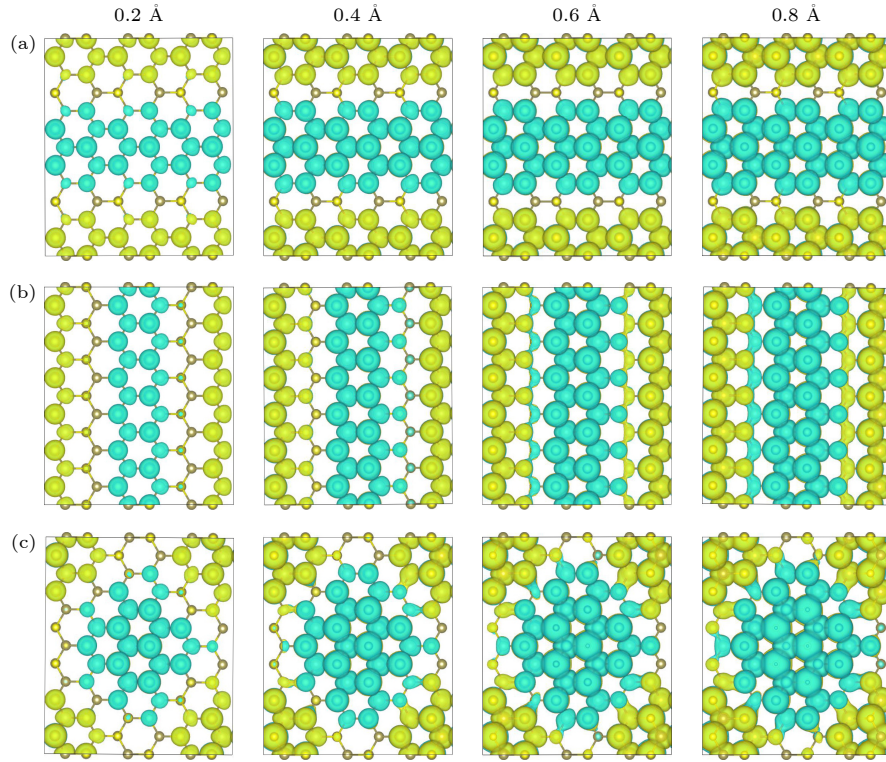


图 5 不同褶皱振幅的电子密度差 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型; (c) 皱纹型

Fig. 5. Electron density difference at different wrinkle amplitudes: (a) Armchair ripple; (b) Zigzag ripple; (c) Wrinkles.

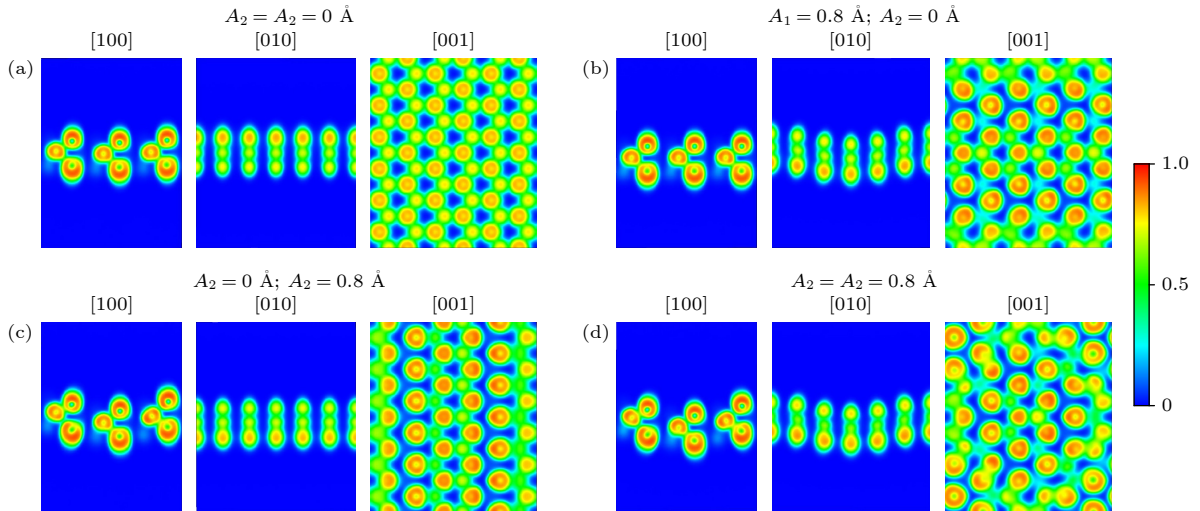


图 6 不同晶向 ([100], [010] 和 [001]) 的电子局域化函数分布 (a) 本征; (b) 扶手椅型; (c) 锯齿型; (d) 皱纹型

Fig. 6. Electronic localization function distribution along different crystal orientations ([100], [010], and [001]): (a) Flat; (b) Armchair ripple; (c) Zigzag ripple; (d) Wrinkles.

迁移的趋势. 而在 [001] 面, 观测到大范围但空间分布较为弥散的绿色连通区. 这种缺乏强定域特征的全局性离域行为, 说明了扶手椅型在带隙闭合调控上的局限性. 图 6(c) 所示的锯齿型褶皱展现出显著的方向依赖性与结构协同效应. [010] 方向视图揭示了应变场导致的层间间距非均匀收缩, 增强了层间轨道重叠. 在 [001] 面, 沿锯齿轴向形成了

高度对称且连续的绿色线性通道, 表明电子在该路径上实现了有效局域化. 通过应变梯度对 M—Te 键链的协同调控, 形成的“S—Te—Te”三明治型配位显著增强了层间轨道杂化, 进而构建出高效电子传输通路, 从结构层面解释了能带带隙剧烈闭合的内在原因. 在图 6(d) 所示的皱纹型褶皱中, ELF 图像显示了非均匀应变梯度的复杂空间分布. [100]

与 [010] 侧视图共同反映了拉伸区与压缩区处电子密度的剧烈不对称波动. [001] 视图显示压缩区内的离域网络保持空间连通, 但 ELF 值整体升高, 局部电子关联显著增强; 而在拉伸与压缩的过渡区, 原本连续的电子分布发生物理断裂, 形成孤立的红色高值局域区. 这种压缩区局域化增强与边界路径断裂并存的特征, 表明皱纹构型通过重构长程离域路径, 实现了对电子行为从微观局域到宏观传输的多尺度调控.

3.5 应变梯度调控 Janus STe_2 的电子热导率

图 7 显示了室温下单层 Janus STe_2 在不同褶皱应变下的电子热导率变化. 研究表明, 本征状态的热导率为 $1.15 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 与文献 [33] 结果一致. 计算结果表明扶手椅型的热导率呈现单调递增趋势, 从 $1.15 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 增至 $315.52 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 其中振幅在 $0.4\text{--}0.8 \text{ \AA}$ 区间增速加快; 锯齿型在振

幅为 $0.8 \text{ \AA}$ 时达到 $416.89 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$; 皱纹型在振幅为 $0.6 \text{ \AA}$ 后出现剧增, 从 $52.18 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 飙升至 $425.36 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. 上述结果明确表明了褶皱构型与热输运性能之间的显著关联.

这种应变梯度诱导的输运增强并非空间均匀分布的, 其热流传导效率高度依赖于褶皱产生的几何对称性破缺. 为了进一步探究这种方向选择性, 图 8 分别展示了 3 种褶皱构型下, 沿 x 方向与 y 方向的电子热导率各向异性对比. 图 8(a) 所示的扶手椅型构型在 $0\text{--}0.4 \text{ \AA}$ 时增长较为平缓, 随着褶皱振幅进一步增大到 $0.8 \text{ \AA}$ 时, XX 方向的热导率增至 $551.71 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 而 YY 方向为 $282.08 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 展现出显著的输运各向异性, 比值接近 2 倍. 这表明应变梯度在 x 方向诱导了强烈的能带重构, 成功构建了高效的定向导热通道. 图 8(b) 锯齿型与扶手椅型相比, 在 $A = 0\text{--}0.6 \text{ \AA}$ 区间的增强效应较弱, 但在 $A = 0.8 \text{ \AA}$ 时实现了增长, 且 XX 方向 $427.07 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 与 YY 方向 $423.65 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 的数值高度接近, 表现出极弱的各向异性特征. 这说明 y 方向的原子排列对应变梯度具有更均匀的空间响应, 应变诱导的电荷离域化在二维平面内呈现出均衡分布, 使其在强应变梯度下表现出近乎各向同性的准金属输运特征. 图 8(c) 所示的皱纹型构型在 $A = 0.6 \text{ \AA}$ 时展现了所有模型中最高瞬时电子热导率, XX 方向高达 $543.40 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 呈现出极强的散热开关效应. 然而, 当振幅进一步增至 $0.8 \text{ \AA}$ 时, 其热导率反而出现回落, XX 方向降至 $449.26 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. 这种现象反映了复杂多维应变梯度下的竞争机制: 适度的褶皱可显著提升, 但过度形变导致的晶格畸变可能引入了强烈的电子散射中心, 从而限制了热导率的持续攀升.

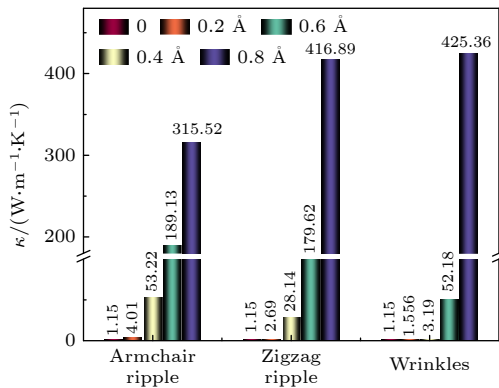


图 7 不同褶皱振幅下单层 Janus STe_2 的电子热导率 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型; (c) 皱纹型

Fig. 7. Electronic thermal conductivity of monolayer Janus STe_2 as a function of wrinkle configurations: (a) Armchair ripple; (b) Zigzag ripple; (c) Wrinkles.

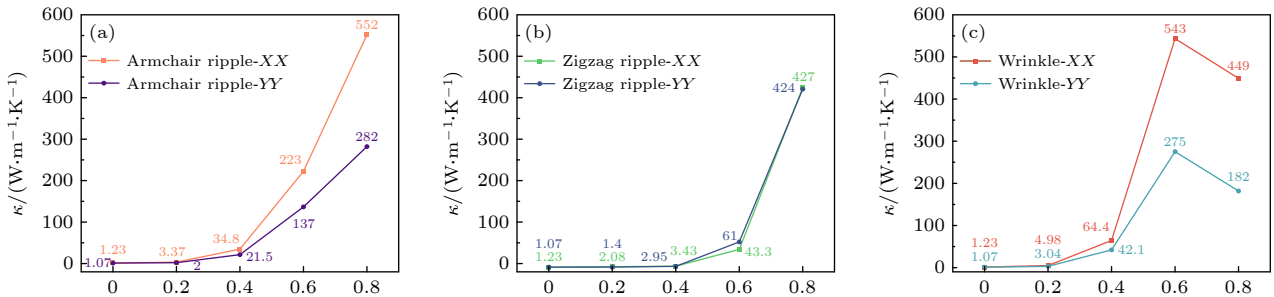


图 8 沿 x 方向与 y 方向的电子热导率各向异性对比 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型; (c) 皱纹型

Fig. 8. Evolution of electronic thermal conductivity anisotropy along the x -direction and y -direction under different configurations: (a) Armchair ripple; (b) Zigzag ripple; (c) Wrinkles.

为全面评估应变梯度对 Janus STe_2 电子热输运性能的调控效果, 本文将其褶皱应变后的热导率与典型二维材料及传统热管理材料进行了横向对比, 如表 1 所示. 单层 MoS_2 的电子热导率通常维持在 $20\text{--}100\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 的量级^[34,35], 其他 Janus TMDs 如 Janus MoSSe ^[36] 也处于相似范围. 相比之下, 高导热石墨烯^[37,38] 其电子热导率可达数千 $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. 而传统块体金属如铜则约 $400\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ^[39]. Janus STe_2 导体-金属可控转变特性, 在柔性电子器件中展现出独特的应用潜力, 其在应变梯度调控下的电子热导率更已达到甚至略高于块体金属的水平. 这一结果表明, 应变梯度工程能够显著提升二维材料的热输运性能, 使其在特定条件下具备与传统大尺寸金属材料相当的导热能力, 为开发兼具结构柔性与高效散热性能的新型微纳器件提供了可行路径.

表 1 电子热导率汇总

Table 1. Summary of electronic thermal conductivity.

材料名称	电子热导率/ $(\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$
MoS_2	20—100
Janus MoSSe ^[36]	50—150
石墨烯 ^[37,38]	2000—5000
铜 ^[39]	400
Wrinkled Janus STe_2	425.36

4 讨 论

本文研究结果表明, 单层 Janus STe_2 的电子与热输运性能对应变梯度表现出极高的敏感性与可调控性, 且电子热导率的演化规律与能带结构的阶段性特征表现出显著的物理一致性. 在能带结构调控方面, 3 种褶皱构型均能有效驱动 Janus STe_2 的带隙闭合, 实现半导体到金属的相变. 皱纹型褶皱展现出最高的调控效率, 在 $A = 0.6\text{ \AA}$ 下即可触发相变. 这一现象的微观根源在于应变梯度对 Te-5p 轨道电子云的显著影响. 随着褶皱振幅的增大, 应变诱导的晶格畸变, 增强了 Te 原子间 p 轨道电子云的重叠与相互作用. 这种增强的相互作用压制了 Te-5p 反键轨道的能量, 使其向费米能级靠近, 同时 Te-5p 主导的峰值减小并显著展宽, 体现了电子态从定域性向离域性的转变. 皱纹型褶皱构型下 Te-5p 峰向费米能级靠近的趋势最为明显, 且峰值减小和展宽的程度也最为显著, 表明不同的应变梯度分布对 Te 原子的局域环境和轨道杂化产生了差

异化的影响, 其中皱纹型构型在促进电子离域化和能带弥散化方面表现出更高的效率. 此外, 电子密度差和电子局域函数分析进一步揭示了电荷重分布及 S-Te 键共价性的增强是能带重构的核心诱因: 褶皱压缩区的电子局域化程度加深, 而拉伸区的离域路径发生断裂. 在电子热输运方面, 应变梯度诱导的输运增强并非空间均匀分布, 其热流传导效率高度依赖于褶皱产生的几何对称性破缺. 在 $A = 0.2\text{ \AA}$ 时, 扶手椅型构型因对面外镜像对称性破缺更为敏感, 其带隙缩减与热导率起始增长点均优于锯齿型; 然而, 随着应变梯度持续增强, 锯齿型构型展现出更强的后发优势并最终实现数值反超. 电子局域函数分析揭示了这一现象的深层机制: 锯齿型褶皱在强应变下诱导了更剧烈的层间轨道重构, 构筑了沿轴向高度对称且连续的“ S-Te-Te ”线性局域化通道. 这种强化的轨道杂化极大地提升了载流子输运效率, 使其在强形变区间的能带闭合速率与热导率峰值均优于扶手椅型. 此外, 应变梯度不仅改变了导热总量, 还通过打破空间对称性实现了显著的输运各向异性. 扶手椅型构型虽在电荷转移总量上略逊于皱纹型, 但其单轴非均匀应变有效地筛选了导电通道, 使电荷在 x 方向强离域而在 y 方向受限, 从而在较低的电荷扰动下构筑了高对比度的定向散热通道. 这种从微观成键到宏观输运性能的一致性响应, 有力地证明了应变梯度对 Janus 体系物理特性的多维度协同调控作用.

5 结 论

本文通过基于密度泛函理论的第一性原理计算, 系统揭示了应变梯度对单层 Janus STe_2 电子结构与电子热输运性能的调控规律及其深层微观机制. 研究发现, 褶皱构型引入的应变梯度能够有效地驱动 Janus STe_2 的能带结构重构, 实现从半导体到金属的相变, 其中皱纹型褶皱展现出最高的调控效率. 微观机制分析证实, 这一过程主要由 Te-5p 轨道主导的电荷重分布以及 S-Te 键共价性的增强所驱动, 表现为压缩区电子局域化增强与拉伸区离域路径断裂. 在电子热输运方面, 3 种褶皱构型的电子热导率均随褶皱振幅的增加呈显著增强趋势, 且表现出明显的各向异性. 扶手椅型褶皱凭借其单轴非均匀应变诱导的电荷选择性离域, 展现出最显著的输运各向异性, 并成功构建了高效

定向散热通道. 本研究的核心贡献在于, 通过深入剖析褶皱构型引入的应变梯度如何打破单层 Janus STe_2 的本征对称性约束, 驱动电荷重分布并诱导能带重构, 从而实现了电子态与电子热输运特性的各向异性精准调控. 这些发现为未来通过应变梯度工程设计和优化高性能、可调控的柔性微纳器件

提供了关键理论依据, 并为相关实验研究指明了重要的前瞻性方向.

感谢杭州电子科技大学超算中心对本文工作的支持.

附录 A

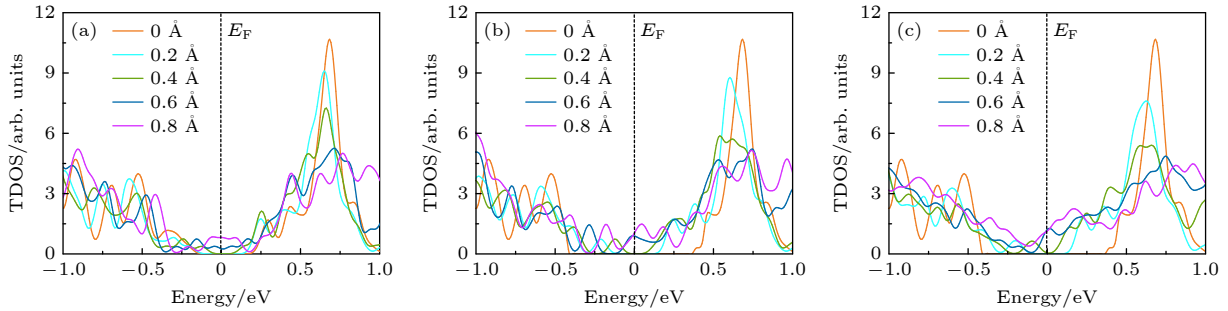


图 A1 不同褶皱构型下的总态密度 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型; (c) 皱纹型

Fig. A1. TDOS of ripple configurations: (a) Armchair ripple; (b) Zigzag ripple; (c) Wrinkles.

参考文献

- [1] Dong L, Lan Y W, Shenoy V B 2017 *ACS Nano* **11** 8242
- [2] Lu A Y, Zhu H, Xiao J, Chuu C P, Han Y, Chiu M H, Cheng C C, Yang C W, Wei K H, Yang Y, Wang Y, Sokaras D, Nordlund D, Yang P, Muller D A, Chou M Y, Zhang X, Li L J 2017 *Nat. Nanotechnol.* **12** 744
- [3] Li F P, Wei W, Zhao P, Huang B B, Dai Y 2017 *J. Phys. Chem. Lett.* **8** 5959
- [4] Zhang J, Jia S, Kholmanov I, Dong L, Er D Q, Chen W B, Guo H, Jin Z H, Shenoy V B, Shi L, Luo J 2017 *ACS Nano* **11** 8192
- [5] Lu H Z, Wang W, Shi S F, Li X Z 2017 *Phys. Rev. B* **95** 245430
- [6] Hu T, Jia F H, Zhao G D, Wu J Y, Alessandro S, Wei R 2018 *Phys. Rev. B* **97** 235404
- [7] Ji Y J, Yang M Y, Li H P, Hou T J, Wang L, Li Y Y, Lee S T 2018 *J. Phys. Chem. C* **122** 3123
- [8] Li Y, Duerloo K A N, Wauson K, Reed E J 2016 *Nat. Commun.* **7** 10671
- [9] Qi J J, Lan Y W, Stieg A Z, Chen J H, Zhong Y L, Li L J, Chen C D, Zhang Y, Wang K L 2015 *Nat. Commun.* **6** 7430
- [10] Kumari A, Nag A, Kumar J 2023 *Comput. Mater. Sci.* **218** 111925
- [11] Zhang Y B, Tang T T, Girit C, Hao Z, Martin M C, Zettl A, Crommie M F, Shen Y R, Wang F 2009 *Nature* **459** 820
- [12] Xiao D, Liu G B, Feng W X, Xu X D, Yao W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 196802
- [13] Wang Q H, Kalantar-Zadeh K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 699
- [14] Lamba A, Kumar R, Singh M, et al. 2025 *Eur. Phys. J. Plus* **140** 336
- [15] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Xuan R X, Dai X Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7947 (in Chinese) [宋建军, 张鹤鸣, 胡辉勇, 宣荣喜, 戴显英 2009 物理学报 **58** 7947]
- [16] He K L, Poole C, Mak K F, Shan J 2013 *Nano Lett.* **13** 2931
- [17] Feng J, Qian X F, Huang C W, Li J 2012 *Nat. Photonics* **6** 866
- [18] Wang Y, Wang Z, Yao W, Liu G B, Yu H Y 2017 *Phys. Rev. B* **95** 115429
- [19] Chen S B, Guo S D, Yan W J, Zeng Z Y, Xu M, Chen X R, Geng H Y 2023 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25** 10827
- [20] Yu L P, Ruzsinszky A, Perdew J P 2016 *Nano Lett.* **16** 2444
- [21] Tang H, Breslin J M, Yin L, Ruzsinszky A 2023 *Phys. Rev. Mater.* **7** 084201
- [22] Yi M, Shen Z G 2015 *J. Mater. Chem. A* **3** 11700
- [23] Yan K, Fu L, Peng H L, Liu Z F 2013 *Acc. Chem. Res.* **46** 2263
- [24] Shen J F, He Y M, Wu J J, Gao C T, Keyshar K, Zhang X, Yang Y C, Ye M X, Vajtai R, Lou J, Ajayan P M 2015 *Nano Lett.* **15** 5449
- [25] Yang S X, Chen Y J, Jiang C B 2021 *InfoMat* **3** 397
- [26] Wu Z G, Cohen R E 2006 *Phys. Rev. B* **73** 235116
- [27] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15
- [28] Troullier N, Martins J L 1991 *Phys. Rev. B* **43** 1993
- [29] Chadi D J 1977 *Phys. Rev. B* **16** 1746
- [30] Hirel P 2015 *Comput. Phys. Commun.* **197** 212
- [31] Fasolino A, Los J H, Katsnelson M I 2007 *Nat. Mater.* **6** 858
- [32] Yu H T, Sun M Z, Wu X, Chan C H, Huang B L, Wang Z L 2023 *Nano Res.* **17** 2136
- [33] Singh J, Jakhar M, Kumar A 2022 *Nanotechnology* **33** 215405
- [34] Xia M, Yan Q Z, Guo H Y, Lang S T, Ge C C 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 184307
- [35] Sohier T, Campi D, Marzari N, Gibertini M 2018 *Phys. Rev. Mater.* **2** 114010
- [36] Ma Y, Li Y, Gao X, Li W 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 10086
- [37] Balandin A A, Ghosh S, Bao W, Calizo I, Teweldebrhan D, Miao F, Lau C N 2008 *Nano Lett.* **8** 902
- [38] Cai W, Moore A L, Zhu Y, Li X, Chen S, Shi L, Ruoff R S 2010 *Nano Res.* **3** 153
- [39] Ho C Y, Powell R W, Liley P E 1974 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **1** 279

Strain gradient-induced band and anisotropic electronic thermal transport in monolayer Janus STe_2 *

ZHAO Shulei¹⁾ CHEN Peiyao¹⁾ XU Guangxi¹⁾CHEN Xumin^{1)†} HUO Dexuan²⁾¹⁾ (School of Science, Hangzhou Dianzi University, Hangzhou 310018, China)²⁾ (School of Materials and Environmental Engineering, Hangzhou Dianzi University, Hangzhou 310018, China)

(Received 8 February 2026; revised manuscript received 12 March 2026)

Abstract

Janus monolayers have emerged as a pivotal platform for next-generation nanoelectronics due to their intrinsic broken mirror symmetry and strong sensitive response to external fields. In this work, we systematically investigate the strain-gradient-induced evolution of electronic structures and thermal transport properties in monolayer Janus STe_2 using first-principles calculations. By constructing three distinct corrugated architectures—Armchair ripple, Zigzag ripple, and Wrinkles—we introduce non-uniform strain fields to break the inherent lattice symmetry. Our findings reveal a universal semiconductor-to-metal transition (SMT) driven by the narrowing of the bandgap as the wrinkle amplitude increases. Notably, the Wrinkle configuration exhibits the highest modulation efficiency, triggering the SMT at a critical amplitude of 0.6 Å. Detailed analysis of the projected density of states (PDOS) and electronic localization function (ELF) elucidates that this transition is rooted in the orbital-selective response of Te-5p states. The strain gradient induces a significant redistribution of charge from compressed regions to tensile zones, enhancing the covalent character of S—Te bonds and establishing long-range delocalization pathways via reconstructed “S-Te-Te” coordination. Regarding thermal transport, the electronic thermal conductivity κ_e of Janus STe_2 undergoes a dramatic leap of nearly two orders of magnitude under strain gradients, reaching values comparable to bulk copper ($425.36 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$). We demonstrate that the transport behavior is highly configuration-dependent: the Armchair ripple creates a high-contrast directional heat channel with a significant κ_x/κ_y anisotropy ratio, while the Zigzag ripple provides superior isotropic dissipation pathways in the high-deformation regime due to intensified interlayer orbital hybridization. These results not only clarify the microscopic bonding-to-transport consistency in Janus systems but also provide a robust theoretical framework for designing flexible, high-performance thermoelectric and heat-management devices based on strain-gradient engineering.

Keywords: Janus STe_2 , strain gradient, electronic structure modulation, electronic thermal conductivity

DOI: [10.7498/aps.75.20260220](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260220)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260220](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260220)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11874011).

† Corresponding author. E-mail: 41790@hdu.edu.cn



基于应变梯度的单层Janus STe_2 能带与各向异性电子热输运的调控

赵书磊 陈佩瑶 徐光羲 陈许敏 霍德璇

Strain gradient-induced band and anisotropic electronic thermal transport in monolayer Janus STe_2

ZHAO Shulei CHEN Peiyao XU Guangxi CHEN Xumin HUO Dexuan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 130706 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260220

CSTR: 32037.14.aps.75.20260220

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260220>

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

钙钛矿超晶格材料界面二维电子气的调控

Tuning two-dimensional electron gas at $\text{LaAlO}_3/\text{KNbO}_3$ interface by strain gradient

物理学报. 2023, 72(17): 176801 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230573>

弯曲应变梯度作用下铁电三层膜畴翻转的相场模拟研究

Phase-field simulation of domain switching in ferroelectric trilayer films under bending-induced strain gradient

物理学报. 2025, 74(12): 127501 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250334>

高压下 α -铀热输运性质的第一性原理计算

First principles calculations of lattice dynamics and thermal transport properties of alpha uranium under high pressure

物理学报. 2025, 74(17): 174401 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250619>

双轴应变对单层Janus过渡金属硫族化合物热输运和热电性能的影响

Influence of biaxial strain effects on thermal transport and thermoelectric performance of Janus transition metal dichalcogenide monolayers

物理学报. 2025, 74(13): 137202 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250295>

Janus $\text{MoSSe/g-C}_3\text{N}_4$ 异质结的电子性质及其双轴应变调控

Electronic properties and biaxial strain regulation of Janus- $\text{MoSSe/g-C}_3\text{N}_4$ heterostructures

物理学报. 2026, 75(1): 137202 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251158>

单层Janus MoSSe 在不同手性角单轴拉伸应变下力学性质的第一性原理研究

First-principles study of mechanical properties of Janus monolayer MoSSe under uniaxial tensile strains at different chiral angles

物理学报. 2025, 74(16): 166201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250437>