

## 补充材料

二维  $XO_2$  ( $X = Ni, Pd, Pt$ ) 弹性、电子结构和热导率\*

方文玉<sup>1)‡</sup> 陈粤<sup>1)‡</sup> 叶盼<sup>1)</sup> 魏浩然<sup>1)</sup> 肖兴林<sup>1)</sup>

黎明锴<sup>1)†</sup> Ahuja Rajeev<sup>2)</sup> 何云斌<sup>1)‡</sup>

1) (湖北大学材料科学与工程学院, 铁电压电材料与器件湖北省重点实验室, 高分子材料湖北省重点实验室,

功能材料绿色制备与应用教育部重点实验室, 武汉 430062)

2) (乌普萨拉大学物理与天文系凝聚态理论组, 瑞典乌普萨拉 S-751-20)

(2021年5月28日收到; 2021年9月5日收到修改稿)

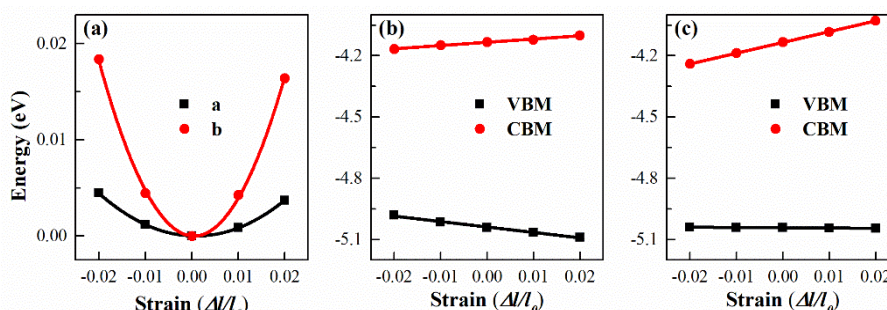


图 S1 二维黑磷烯的平面刚度和形变势拟合示意图 (a) 晶胞总能增量在不同应变下的二次曲线拟合; (b), (c)  $a$  和  $b$  两个方向上 VBM 和 CBM 相对真空能级的位置, 与应变之间做线性拟合

Fig. S1. Schematic diagram of plane stiffness and deformation potential of monolayer phosphorene: (a) Quadratic fitting of the energy difference to the uniaxial strain are used to calculate the plane stiffness; (b) and (c) linear fitting of the energy of VBM and CBM relative to the uniaxial strain along  $a$  and  $b$  direction, which are used to calculate the deformation potential.

表 S1 二维  $XO_2$  和 BP 在不同应变下的真空能级

Table S1. Vacuum-level of monolayer  $XO_2$  and BP at different strains.

Monolayers	Along armchair/ $a$ direction /eV				host	Along zigzag/ $b$ direction /eV			
	-2%	-1%	1%	2%		0.0%	-2%	-1%	1%
NiO <sub>2</sub>	1.845	1.825	1.788	1.770	1.806	1.845	1.825	1.788	1.770
PdO <sub>2</sub>	1.895	1.874	1.833	1.813	1.853	1.895	1.874	1.833	1.813
PtO <sub>2</sub>	1.916	1.895	1.854	1.834	1.875	1.916	1.895	1.854	1.834
BP	2.764	2.810	2.787	2.741	2.720	2.810	2.787	2.741	2.719

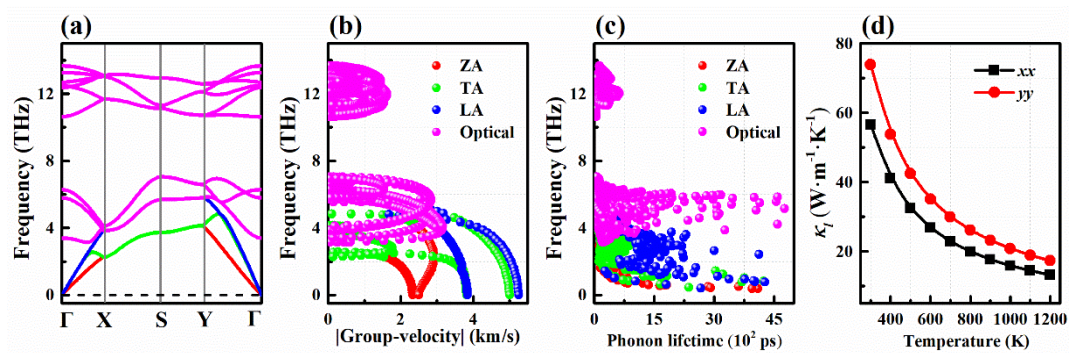


图 S2 单层黑磷烯的(a)声子谱、(b) 群速度、(c) 声子寿命和(c) 晶格热导率  
 Fig. S2. (a) Phonon dispersion, (b) group velocity, (c) phonon lifetime and lattice thermal conductivity of Phosphorene