

补充材料(2025 *Acta Phys. Sin.* 74 186303)

AgBiS₂ 光电与热电性能的第一性原理研究

王思航^{1) #} 陈梦菡^{2) #} 张丽萍^{1) †}

1) (中国矿业大学材料与物理学院, 徐州 221116)

2) (中国矿业大学力学与土木工程学院, 徐州 221116)

同等贡献作者

† 通信作者. E-mail:3391@cumt.edu.cn

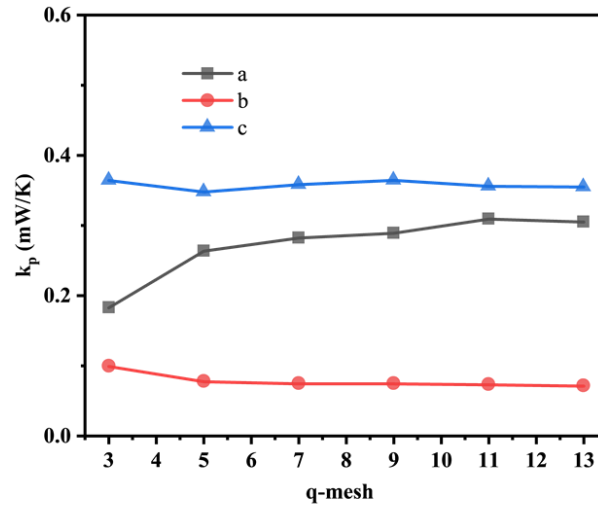


图 S1 300 K 下晶格热导率和 q 点密度的关系

Fig. S1. Relationship between lattice thermal conductivity and q -point density at 300 K.

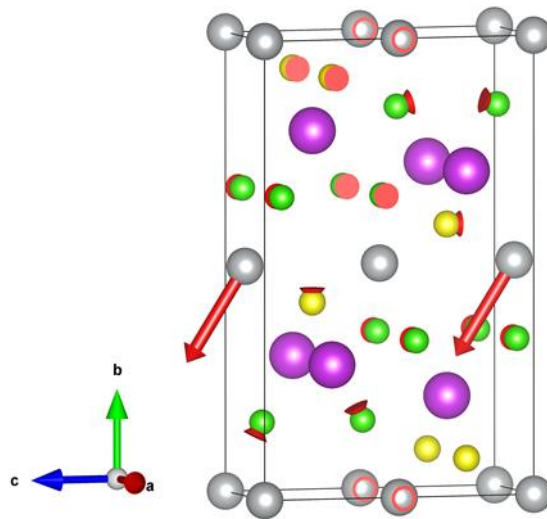


图 S2 LA 分支在 R 点的振动可视化(箭头大小代表位移向量大小)

Fig. S2. Visualization of the LA branch vibrations at the R point (arrow size represents the magnitude of the displacement vectors).

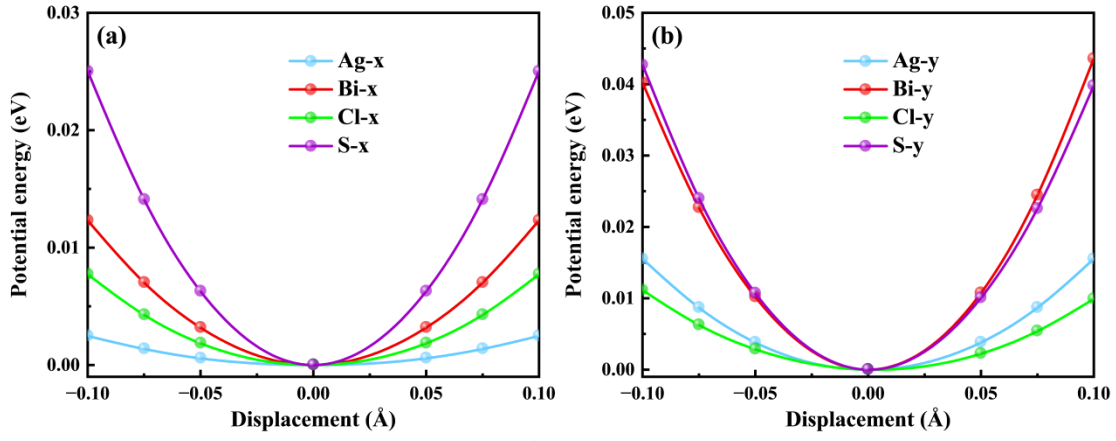


图 S3 AgBiSbCl₂ 所有原子的势能曲线，即其作为沿 (a)x 和(b)y 方向的平衡位置周围位移的函数

Fig. S3. Potential energy curves of all atoms in AgBiSbCl₂ as a function of displacement around the equilibrium position along (a) the *x* direction and (b) the *y* direction.

表 S1 AgBiSbCl₂ 的晶格常数 (*a*, *b* 和 *c*)、体积模量 (*B*)、剪切模量 (*G*)、杨氏模量 (*Y*)、泊松比 (*ν*) 和德拜温度 (*θ_D*)

Table S1. Lattice constants (*a*, *b*, and *c*), bulk modulus (*B*), shear modulus (*G*), Young's modulus (*Y*), Poisson's ratio (*ν*), and Debye temperature (*θ_D*) of AgBiSbCl₂.

Parameters	当前计算	实验值
<i>a</i> /Å	4.07	3.97
<i>b</i> /Å	14.17	13.71
<i>c</i> /Å	8.69	8.82
<i>B</i> /GPa	45.31	—
<i>G</i> —GPa	20.65	—
<i>B</i> — <i>G</i>	2.19	—
<i>Y</i> —GPa	53.79	—
<i>ν</i>	0.30	—
<i>θ_D</i> —K	219	—