

理论探索二维 $X_2\text{UO}_4$ ($X = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) 的力学特征、电子结构和声子输运特征

程 钧

(湖北医药学院 研究生院, 十堰 442000)

摘 要: 本文用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 研究了三种建议的二维材料 $X_2\text{UO}_4$ ($X = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) 的稳定性、弹性、电子结构和声子振动特性. 计算结果显示, 三种材料同时具备较好的热力学、动力学和机械稳定性. 电子结构表明, 三种材料属于宽禁带间接半导体, 其计算能隙分别是 3.90、3.79 和 3.42 eV, 并且在 300 K 时有着 $71.31 \sim 174.23 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 的电子迁移率. 声子输运特性表明, 三种材料的声子色散均没有虚频出现, 声学模和低频光学模呈现强烈耦合, 且有着低频率 low-lying 声子, 这使得材料具备很强的声子非谐效应、低声子群速度和强声子散射率, 从而表现出很低晶格热导率, 在 300 K 温度下时仅为 $0.16 \sim 0.19 \text{ W/mK}$. 这些特性表明, 二维 $X_2\text{UO}_4$ ($X = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) 在纳米电子和热电器件领域具备应用潜力.

关键词: 二维材料; 能带; 迁移率; 声子; 热导率

中图分类号: O482.6

文献标志码: A

DOI: 10.19855/j.1000-0364.2025.026003

Theoretical investigation of the mechanical properties, electronic structure and phonon transport characteristics of 2D $X_2\text{UO}_4$ ($X = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$)

CHENG Jun

(Graduate School, Hubei University of Medicine, Shiyan 442000, China)

Abstract: Based on the first principles of density functional theory, we proposed three novel two-dimensional materials, KU_2O_4 , RbU_2O_4 and CsU_2O_4 , and further investigated their stabilities, elastic, electronic structure and phonon vibration characteristics. The calculation results show that the three 2D materials are wide-gap indirect semiconductors, with band-gaps of 3.90, 3.79, and 3.42 eV, respectively, and deliver electron mobilities of $71.31 \sim 174.23 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ at 300 K. The phonon transport results show that all phonon dispersions have no virtual frequency, in which acoustic and low-frequency optical modes are strongly coupled, as well as low-frequencies for low-lying phonons, resulting in strong phonon-phonon anharmonic effect, low phonon group velocities and strong phonon scattering rates. As a result, they exhibit low lattice thermal conductivities of $0.16 \sim 0.19 \text{ W/mK}$ at 300 K. All these properties indicate that 2D $X_2\text{UO}_4$ ($X = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) have high potential applications in the field of nanoelectronics and thermoelectric devices.

Key words: Two-dimensional material; Band structure; Mobility; Phonon; Thermal conductivity

1 引 言

随着科学技术的快速发展和人民生活水平的大幅提升, 新型电子产品和功能设备不断推陈

出新, 逐渐走向多功能化和小尺寸方向发展. 例如, 电脑芯片、集成电路和智能设备的高尖端技术都集中在微米甚至纳米尺寸. 自 2004 年石墨烯都被首次制备出来, 二维材料因其独特的形貌、

收稿日期: 2023-08-01

基金项目: 湖北省教育厅科学研究计划项目(B2021159); 十堰社科思想库课题项目(sysk202330)

作者简介: 程钧(1985—), 男, 湖北黄冈人, 硕士, 从事核材料的第一性原理计算. E-mail: chengjun19850105@sina.cn

新颖的电子结构和量子限域效应等特征而备受关注，并在新材料、新器件和新技术领域显得非常重要。随后，一些列新型二维材料被陆续报道，例如过渡金属硫化物(TMDC)^[1]、黑磷烯^[2]、石墨烯和铋烯^[3]和过渡金属氮化物^[4]等。当前，仍然有新的二维材料被陆续挖掘，这使得二维材料大家族被不断完善与丰富。一般而言，新型二维材料需要具备如下特征：(1) 二维材料对应的块体材料属于层状结构，类似于石墨和 MoS₂，且毗邻层之间由弱键和范德华力相连，以便于通过机械剥离方法获取^[5]；(2) 新材料需具备高稳定性，稳定性是新型功能材料的应用前提，一般包括机械稳定性、热稳定性和动力学稳定性^[6]。

最近，三种碱金属-铀氧化物，分别是 KU₂O₄、RbU₂O₄和 CsU₂O₄，因其独特的结构、简易的制备条件和特殊的电子结构引起了我们的兴趣。例如，Mark 等人^[7]利用熔融氢氧化物助熔剂在密封的银管中制备出 K₂UO₄；这里选用熔融的 KOH 和 15% 的水，再加 0.25 mmol 的 U₃O₈，然后封装在银管中加热到 750℃，保持 1 小时，并在一段时间内缓慢冷却到 650℃ 即可获得碱金属-铀氧化物单晶；该研究还发现 K₂UO₄ 的对称群为 I4/mmm，即为典型的层状结构。Samir 等人^[8]基于密度泛函理论研究了 K₂UO₄ 的晶体结构和电子能带特征，发现 K₂UO₄ 在面内成键较短，导致内聚能很强，有利于晶格稳定性；且 K₂UO₄ 属于间接宽带隙半导体，带隙大于 2 eV。Volkovich 等人^[9]测量了 9 种碱金属-铀氧化物的振动(拉曼和红外)光谱，通过观测和分辨出的谱带的数目与晶体对称性进行比较，推导出了晶体对称性为 I4/mmm。

虽然关于 X₂UO₄ (X = K, Rb, Cs) 的实验和理论研究都已经报道，但是研究对象都是其块体结构，对应的二维结构尚未见报道。在本文中，我们提出三种二维碱金属-铀氧化物，分别是 KU₂O₄、RbU₂O₄和 CsU₂O₄。本文用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，研究了其晶体结构、稳定性、力学特征、电子结构和声子色散特征，并与常见的二维材料作比较，为实验研究提供前瞻性理论指导。

2 计算细节

文章中所有 DFT 模拟都是使用 Vasp5.4.4 软件包^[10]进行的，采用广义梯度近似(GGA)结合 Perdew - Burke - Ernzerhof (PBE) 泛函^[11]来处理

交换关联能。为了消除相毗层之间范德华力的影响，沿 *c* 轴建立了一个 20 Å 的真空层。另外，平面波截止能量设为 500 eV，每个原子的总能量和作用力的收敛准则分别为 1.0 × 10⁻⁸ eV 和 -0.005 eV。自洽场计算中，采用第一布里渊区 Γ 中心点 19 × 19 × 1 的 *k* 点网格求和。此外，由于 PBE 容易低估半导体的带隙，使用 HSE06 泛函^[12]来准确描述能带结构。利用 Phonopy^[13]模拟声子色散和群速度，采用 Phono3Py^[14]计算声子散射率和晶格热导率。为了提升计算效率，利用 hipHive^[15]提取二、三阶力常数。利用变形势理论(DPT)^[16]计算载流子有效质量和迁移率。

3 结果与讨论

3.1 晶体结构与稳定性

如图 1 所示，块体 KU₂O₄ 是一种层状结构，对称群为 I4/mmm，其中 U 原子被 X 和 O 原子包裹住，各原子相互嵌套，形成“牢笼”型结构。沿 *c* 轴方向逐渐减低维度，即可得到单层 KU₂O₄，这与二维 Ca₄Sb₂O 和 Ca₄Bi₂O 的结构相似^[17, 18]。结构弛豫以后的晶格参数列于表 1，不难发现，由于原子半径满足 K (2.35 Å) < Rb (2.50 Å) < Cs (2.72 Å)，三种材料的晶格常数与厚度都是逐渐递增的。首先通过分子动力学模拟(AIMD)验证了三种材料的热稳定性(如图 2 所示)，这里设置 4 × 4 × 1 的超胞，模拟时间 10000 fs，步长为 1 fs。计算结果显示，在 800 K 时超胞接近重构和键断裂现象，且能量不能很好

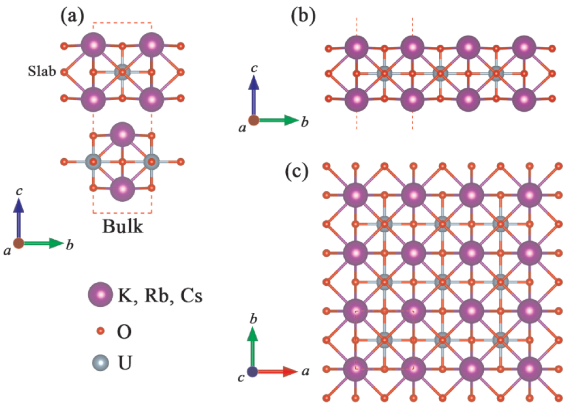


图 1 (a) 块体 X₂UO₄ (X = K, Rb, Cs)；二维 X₂UO₄ (X = K, Rb, Cs) (b) 侧视图和 (c) 俯视图

Fig. 1 (a) Bulk X₂UO₄ (X = K, Rb, Cs)；(b) side views and (c) top views for two-dimensional X₂UO₄ (X = K, Rb, Cs)

表 1 二维 X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) 的晶格常数($a/b, \text{\AA}$)、厚度($h, \text{\AA}$)、计算带隙(E_g, eV)、弹性常数($C_{ij}, \text{N/m}$)、最大杨氏模量($Y, \text{N/m}$)和泊松比(ν)

Table 1 The lattice constants ($a/b, \text{\AA}$), thicknesses ($h, \text{\AA}$), band - gaps (E_g, eV), elastic constants ($C_{ij}, \text{N/m}$), maximum Young's moduli ($Y, \text{N/m}$) and Poisson's ratios (ν) of two - dimensional X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$)

Materials	a/b	h	E_g	C_{11}	C_{12}	C_{22}	C_{66}	Y	ν
K_2UO_4	4. 27	4. 20	3. 90	147. 55	14. 29	147. 55	28. 85	146. 17	0. 47
Rb_2UO_4	4. 29	4. 51	3. 79	145. 58	17. 24	145. 58	32. 34	143. 35	0. 43
Cs_2UO_4	4. 32	4. 83	3. 42	138. 05	19. 07	138. 05	35. 48	135. 42	0. 38

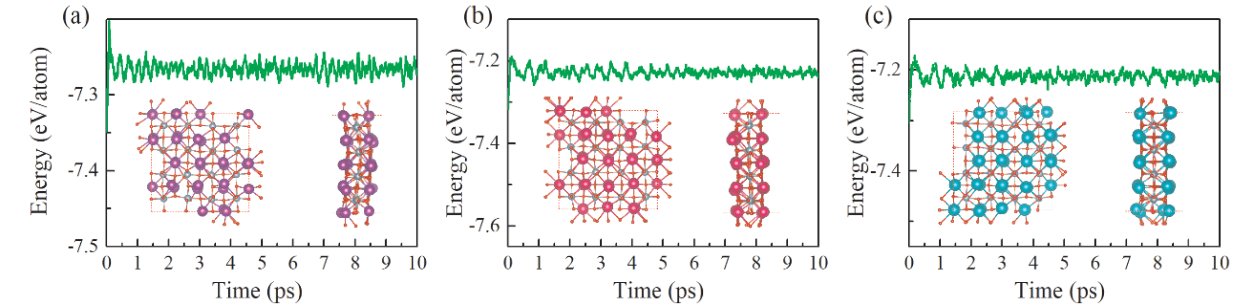


图 2 二维(a) K_2UO_4 、(b) Rb_2UO_4 和(c) Cs_2UO_4 在 700 K 温度下的分子动力学模拟; 插图为加热到 10 ps 后晶胞的构型

Fig. 2 The *ab initio* molecular dynamics (AIMD) of two - dimensional (a) K_2UO_4 , (b) Rb_2UO_4 and (c) Cs_2UO_4 at 700 K; where the illustration shows the structure of the simulated supercell after heating to 10 fs

地收敛,而在 700 K 时,晶胞能量保持收敛且晶胞保持完整的形貌,这说明三种材料具备很好的热稳定性.

此外,还可以通过 Born - Huang 准则^[4]来判断材料的机械稳定性,即 $C_{11}C_{22} - C_{12}^2 > 0$ 和 $C_{66} > 0$, 这里 C_{ij} 表示弹性常数. 计算结果列于表 1,

可以发现三种材料都很好满足该准则,因而具备很好的机械稳定性. 此外,由于晶胞对称性,使得 $C_{11} = C_{22}$. 为表征材料面内的力学特征,我们进一步计算了二维 X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) 的杨氏模量和泊松比,其计算方法如下^[19]:

$$Y(\theta) = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}\sin^4\theta + (\frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} - 2C_{12})\sin^2\theta\cos^2\theta + C_{22}\cos^4\theta} \tag{1}$$

$$\nu(\theta) = \frac{C_{12}\sin^4\theta - (C_{11} + C_{22} - \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}})\sin^2\theta\cos^2\theta + C_{12}\cos^4\theta}{C_{11}\sin^4\theta + (\frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{66}} - 2C_{12})\sin^2\theta\cos^2\theta + C_{22}\cos^4\theta} \tag{2}$$

这里 θ 表示相对于 a 轴的夹角. 如图 3 所示,三种材料有着相似的力学特征,且沿 a 和 b 保持高度各向同性. 杨氏模量的最大值分别为 146. 17、143. 53 和 135. 42 N/m, 这小于二维 MoS_2 (200 N/m)^[20]、BN (270 N/m)^[13] 和石墨烯($350 \pm 3. 15 \text{ N/m}$)^[21, 22].

根据 Umklapp 散射模型^[23]可知,二维 X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) 的杨氏模量偏低,意味其热输运受到抑制,晶格热导率偏低. 此外,三种材料都是常见的正泊松比材料,在沿 $45/135^\circ$ 方向取最大值,分别为 0. 47、0. 43、0. 38,这明显高于 $h -$

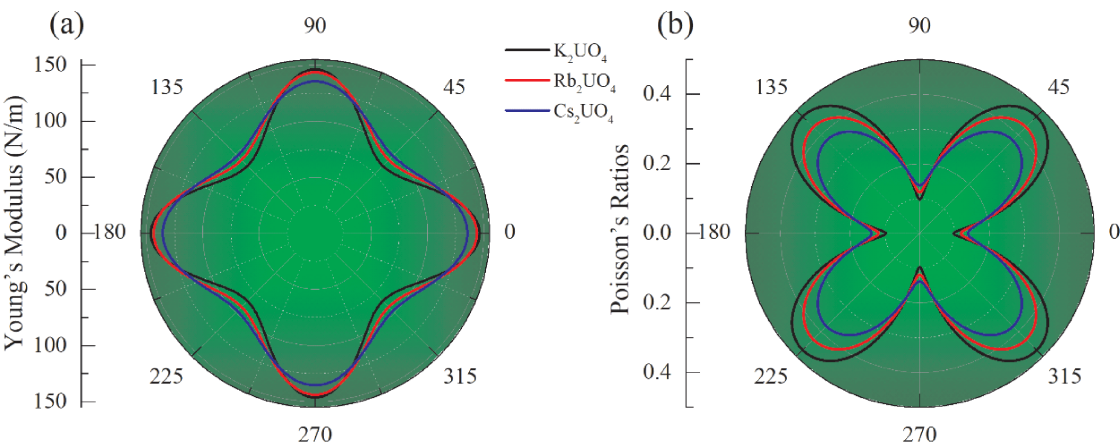


图 3 二维 X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) 的 (a) 杨氏模量和 (b) 泊松比

Fig. 3 The Young's moduli and Poisson's ratios of two-dimensional X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$)

BN (0.211)^[24] 和石墨烯 (0.175)^[25].

3.2 电子结构

由于 PBE 泛函会普遍高估半导体的能隙^[26]，因此采取 HSE06 泛函来准确表征材料的电子能带结构，如图 4 所示. 可以发现，三种材料的价带顶(VBM)位于 Γ 点， K_2UO_4 的导带底(CBM)位于 M 点，而 Rb_2UO_4 和 Cs_2UO_4 的 CBM 则位于 Γ 点，这说明 K_2UO_4 是间接半导体，而后两者则为直接带隙半导体. 此外，二维 X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) 的带隙分别是 3.90、3.79 和 3.42 eV，这稍大于锐钛矿 ZnO (3.3 eV)、碳化硅(3.4 eV)和氮化镓(3.3 eV)，但小于 β -氧化镓 (4.5 eV)^[27]，这使得二维 X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) 在紫外探测器、短波发光二极管等方面具备应用潜力. 载流子迁移是半导体材料的重要性能指标，它可以通过形变势理论^[28, 29] 来求解，即 $\mu_{2D} = \frac{e\hbar^3 C^{2D}}{k_B T m^* m_i^* (E_l^i)^2}$ ，这里 μ_{2D} 、 k_B 、 T 、 e 和 \hbar 分别表示面内迁移率、玻尔兹曼常数、温度、电子电量和约化普朗克常数； m^* 为载流子有效质量，它可以通过求解能量(E)对波矢(k)二阶倒数得到，即 $m^* = \hbar^2 / (\frac{\partial^2 E}{\partial k^2})$ ； C^{2D} 是平面刚度，它可以通过计算晶胞总能(E_t)对应变量(ε)的二阶微分获得，即 $C^{2D} = (\partial E_t / \partial \varepsilon) / S_0$ ，这里 S_0 表示面内面积； E_l^i 则表示形变势常数，它表示 VBM 和 CBM 对应变量的变化率；计算中，设置应变范围 -2% -2% ，步长 1%，通过设置 OPTCELL 选项对未作应变的方向做自由弛豫，即采取固定轴优化的方式进行，计算结果列于表 2. 结果显示，二维 X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) 的电子有效质量都要小

于空穴，即它们属于轻电子重空穴型半导体，这是因为 VBM 的能级色散较 CBM 更加平坦所导致的；三种材料的平面刚度逐步递减，这与它们的杨氏模量规律相吻合；形变势常数取值 3.12 -5.35 eV，这与 Ca_4Sb_2O (4.15 \sim 8.70 eV)^[18] 和 $MgIn_2Se_4$ (4.32 \sim 5.28 eV)^[5] 相当；由于电子有效质量和对应的形变势常数更低，电子迁移率显著高于空穴，取值 71.31、174.23 和 83.57 cm^2/Vs ，这小于 MoS_2 (~ 200 cm^2/Vs)^[30] 和硅烯 (1419 cm^2/Vs)^[31].

表 2 二维 X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) 在 300 K 温度下的载流子有效质量 (m^* ， m_0)、形变势常数 (E_l ，eV)、平面刚度 (C^{2D} ，N/m) 和迁移率 (μ ， cm^2/Vs)

Table 2 The carrier effective masses (m^* ， m_0)，deformation potential constants (E_l ，eV)，plane stiffnesses (C^{2D} ，N/m) and mobilities (μ ， cm^2/Vs) of X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) at 300 K

Materials	Carrier type	m^*	C^{2D}	E_l	μ
KU_2O_4	electron	1.67	91.39	3.12	71.31
	hole	5.22	91.39	3.52	5.76
RbU_2O_4	electron	0.97	87.48	3.36	174.23
	hole	4.18	87.48	4.01	6.62
CsU_2O_4	electron	0.98	79.59	4.60	83.57
	hole	2.92	79.59	5.35	6.95

3.3 声子振动特征

二维 X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) 的声子谱如图 5 所示，不难发现三种材料的声子频率都没有虚频，因此它们都具备较好的动力学稳定性. 此外，所有的声子都表现出很大的色散，且底部三支声学模和光学模呈现强烈耦合，这种耦合容易导致强

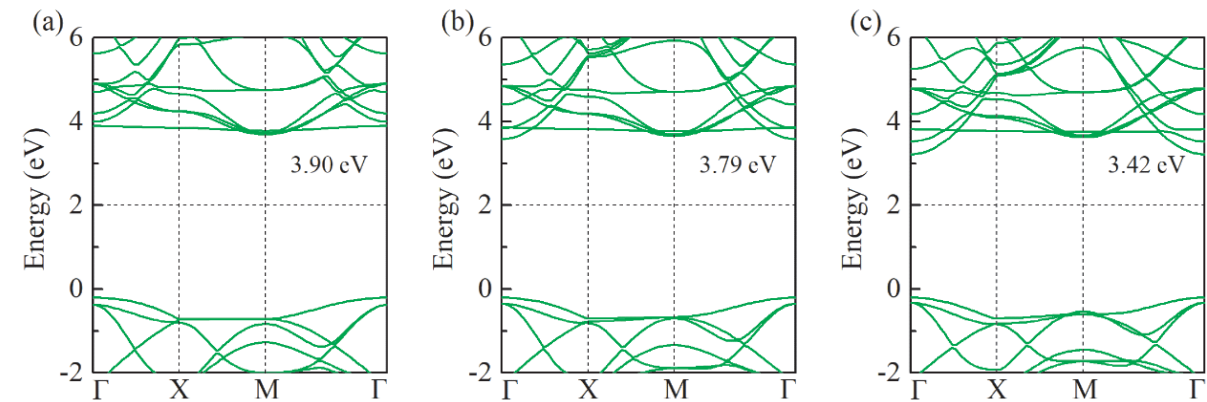


图4 二维(a) K_2UO_4 , (b) Rb_2UO_4 和 (c) Cs_2UO_4 的能带结构

Fig. 4 The band structures of two - dimensional (a) K_2UO_4 , (b) Rb_2UO_4 and (c) Cs_2UO_4

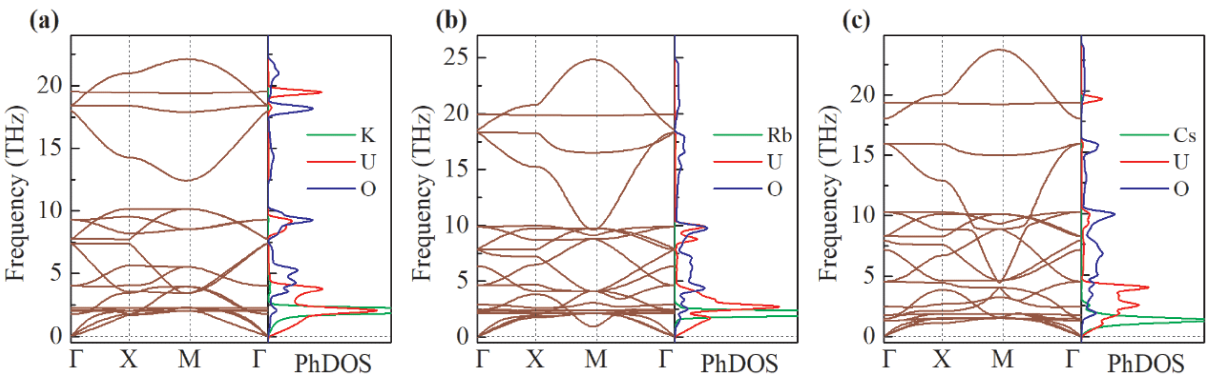


图5 二维(a) K_2UO_4 、(b) Rb_2UO_4 和 (c) Cs_2UO_4 的声子色散(左)和声子态密度(右)

Fig. 5 The phonon dispersions (left) and phonon densities of states (right) of (a) K_2UO_4 , (b) Rb_2UO_4 and (c) Cs_2UO_4

声子非谐散射,从而表现出低晶格热导率^[32]. 一般而言,低晶格热导率的材料往往具备很低频率的 low - lying 声子,即低频光学模在 Γ 点的频率. 三种材料 low - lying 声子在 Γ 点的频率低至 1.78、2.12 和 1.28 THz,这与 2D - Bi_2Se_3 (1.59 THz)^[33]和 Pd_2Se_3 (1.44 THz)^[34]相当. 由声子态密度(phDOS)可以发现,低频声子主要由质量更重的 U 和 K/Rb/Cs 原子提供,而质量更轻的 O 原子则主要贡献高频光学声子. 值得注意的是, U 原子被束缚在“牢笼”结构中,且其声子频率很低,这说明 U 原子属于一种特殊的“Rattling”振动^[35, 36],这会加剧声子 - 声子非谐散射,抑制声子传输.

声子群速度(v_{ph})和声子散射率(ζ_{ph})如图 6 所示,其中群速度可以通过计算声子频率(ω_{ph})对波矢(q_{ph})的一阶导数得到^[37],即 $v_{ph} = \partial\omega_{ph}/\partial q_{ph}$. 这里定义垂直平面方向、平面内横向和平面内纵向声学声子分别为 ZA、TA 和 LA 声子. 对比发现,三种材料有着相似的声学模群速度,最大值分别为 4.17、3.78 和 3.34 km/s,这明显小于

MoS_2 (~ 6.5 km/s)^[38]和砷烯 (~ 4.5 km/s)^[3]. 尽管如此, Rb_2UO_4 和 Cs_2UO_4 在 10 THz 附近的光学声子表现出很大的群速度,最大值甚至高达 8.20 和 10.11 km/s,显著高于 K_2UO_4 . 与此同时,三种材料有着极其相似的声子散射率,主要分布在 $10^{-2} \sim 10^1$ ps⁻¹,这高于 Tellurene^[39]和 γ - graphyne^[40]等许多常见的二维材料. 因此,二维 $X_2\text{UO}_4$ ($X = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$)有着很低的晶格热导率(如图 7 所示),在 300 K 时仅为 0.17、0.18 和 0.19 W/mK,这远低于 Tellurium (7.5 ~ 10.1 W/mK)^[41]、SnTe (7.97 W/mK)^[42]和 γ - GeS (1.07 W/mK)^[43],与 NaCuSe (0.23 W/mK)和 NaCuTe (0.10 W/mK)相当^[44].

4 小 结

基于密度泛函理论的第一性原理计算方法,本文提出了三种新型二维材料,分别是 K_2UO_4 、 Rb_2UO_4 和 Cs_2UO_4 ,并系统探究了其稳定性、电子结构和声子输运特性. 计算结果表明,三种材料都具备高机械稳定性、动力学稳定性和热稳定

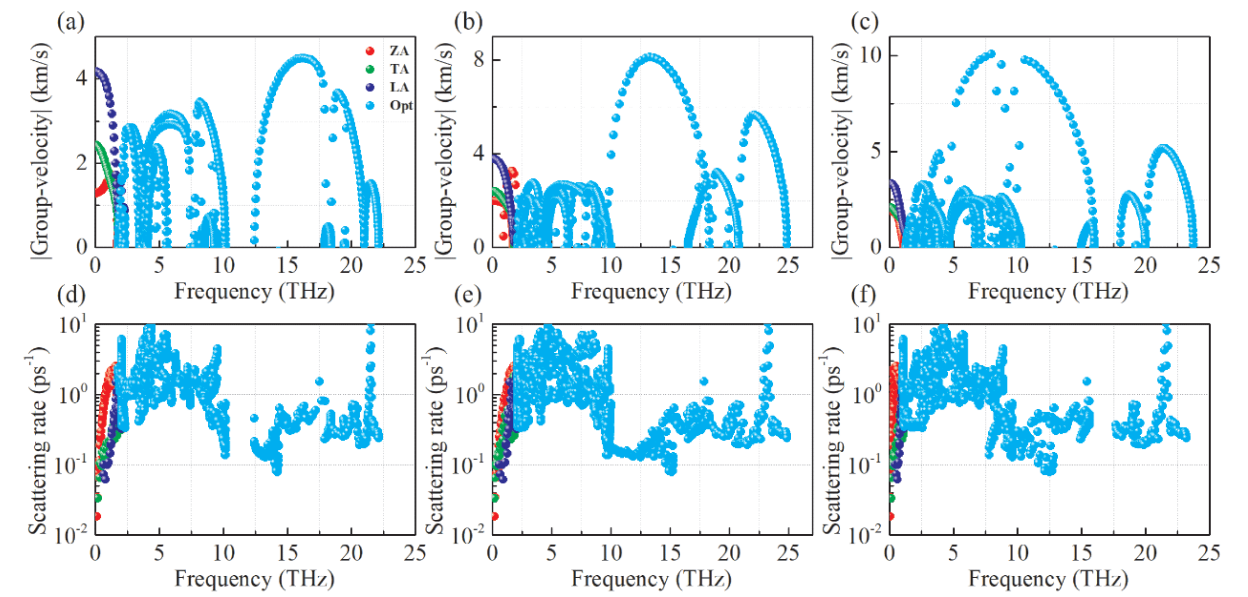


图6 二维(a, d) K_2UO_4 、(b, e) Rb_2UO_4 和 (c, f) Cs_2UO_4 的声子群速度和声子散射率

Fig. 6 The group velocities and phonon scattering rates of two – dimensional (a, d) K_2UO_4 , (b, e) Rb_2UO_4 and (c, f) Cs_2UO_4

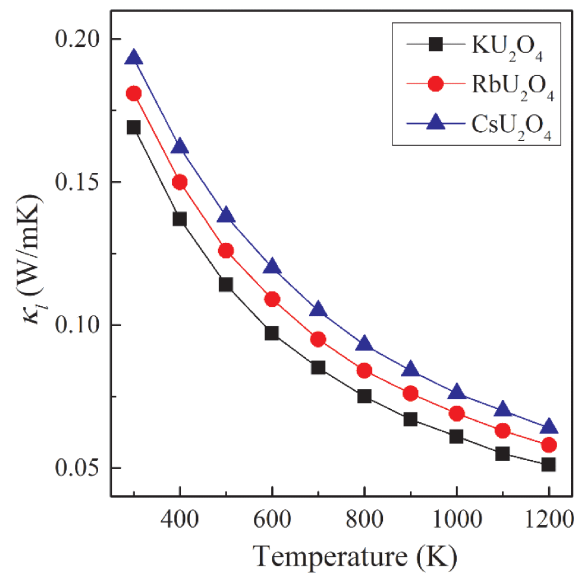


图7 二维 X_2UO_4 ($\text{X} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) 在 300 ~ 1200 K 温度下的晶格热导率

Fig. 7 The lattice thermal conductivities of two – dimensional X_2UO_4 ($\text{X} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) at 300 ~ 1200 K

性，耐热温度高达 700 K. 电子结构表明，三种材料都输运间接宽带隙半导体，计算能隙分别是 3.90、3.79 和 3.42 eV，并且有着 71.31 ~ 174.23 cm^2/Vs 的电子迁移率和 5.76 ~ 6.95 cm^2/Vs 的空穴迁移率. 声子色散结果表明，三种材料的声子谱均没有出现虚频，声学模和低频光学模发生强烈耦合，有着低频率 low – lying 声子，且 U 原子还表现出一种特殊的 “Rattling” 振动，这使得

材料具备很强的声子非谐效应，从而表现出低声子群速度和强声子散射率. 因此二维 X_2UO_4 ($\text{X} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) 表现出极低晶格热导率，在 300 K 时仅为 0.16 ~ 0.19 W/mK，这低于很多常见的二维材料. 以上研究表明，二维 X_2UO_4 ($\text{X} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) 在纳米宽禁带半导体和热电器件领域具备应用潜力.

参考文献：

[1] Zhou M F, Wang W H, Lu J P, *et al.* How defects influence the photoluminescence of TMDCs[J]. *Nano Res.*, 2021, 14: 29.

[2] Fei R X, Yang L. Strain – engineering the anisotropic electrical conductance of few – layer black phosphorus[J]. *Nano Lett.*, 2014, 14: 2884.

[3] Sharma S, Kumar S, Schwingenschlögl U. Arsenene and antimonene: two – dimensional materials with high thermoelectric figures of merit[J]. *Phys. Rev. Appl.*, 2017, 8: 044013.

[4] Sheng X F, Chen S, Kang W B, *et al.* Monolayer XN_2 ($\text{X} = \text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$): novel 2D materials with high stability, simultaneously high electron and hole mobilities from density functional theory[J]. *Mater. Today Commun.*, 2022, 31: 103313.

[5] Fang W, Kuang K, Xiao X, *et al.* *Ab initio* study of two – dimensional MgAl_2Se_4 and MgIn_2Se_4 with high stability, high electron mobility, and high thermoelectric figure of merit[J]. *J. Alloys Compd.*, 2023, 931:

- 167586.
- [6] Song Y Q, Yuan J H, Li L H, *et al.* KTlO_3 : a metal shrouded 2D semiconductor with high carrier mobility and tunable magnetism [J]. *Nanoscale*, 2019, 11: 1131.
- [7] Roof I P, Smith M D, zur Loye H C. Crystal growth of K_2UO_4 and Na_4UO_5 using hydroxide fluxes [J]. *J. Cryst. Growth*, 2010, 312: 1240.
- [8] Matar S F. *Ab-initio* studies of the electronic structures of the hexavalent uranium compounds K_2UO_4 and Na_4UO_5 [J]. *Zeitschrift für Naturforschung B*, 2014, 69: 109.
- [9] Volkovich V A, Griffiths T R, Fray D J, *et al.* Vibrational spectra of alkali metal Li, Na and K uranates and consequent assignment of uranate ion site symmetry [J]. *Vib. Spectrosc.*, 1998, 17: 83.
- [10] Hafner J. *Ab-initio* simulations of materials using VASP: density-functional theory and beyond [J]. *J. Comput. Chem.*, 2008, 29: 2044.
- [11] You H J, Su B Y, Chiang Y T, *et al.* First-principles study on the thermoelectric properties of Sr_2Si and Sr_2Ge [J]. *Mater. Today Phys.*, 2023, 32: 101015.
- [12] Bahuguna B P, Saini L K, Sharma R O, *et al.* Hybrid functional calculations of electronic and thermoelectric properties of GaS, GaSe, and GaTe monolayers [J]. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20: 28575.
- [13] Fang W Y, Xiao X L, Wei H R, *et al.* The elastic, electron, phonon, and vibrational properties of monolayer XO_2 ($X = \text{Cr}, \text{Mo}, \text{W}$) from first principles calculations [J]. *Mater. Today Commun.*, 2022, 30: 103183.
- [14] Liao B L, Zhou J W, Qiu B, *et al.* *Ab initio* study of electron-phonon interaction in phosphorene [J]. *Phys. Rev. B*, 2015, 91: 235419.
- [15] Eriksson F, Fransson E, Erhart P. Thehiphive package for the extraction of high-order force constants by machine learning [J]. *Adv. Theory Simul.*, 2019, 2: 1800184.
- [16] Bardeen J, Shockley W. Deformation potentials and mobilities in non-polar crystals [J]. *Phys. Rev.*, 1950, 80: 72.
- [17] Rahim W, Skelton J M, Scanlon D O. $\text{Ca}_4\text{Sb}_2\text{O}$ and $\text{Ca}_4\text{Bi}_2\text{O}$: two promising mixed-anion thermoelectrics [J]. *J. Mater. Chem. A*, 2021, 9: 20417.
- [18] Sheng X, Fang W, Yao C, *et al.* The stability, mechanical, electronic and thermoelectric properties of unexplored monolayer $\text{Ca}_4\text{Sb}_2\text{O}$ and $\text{Ca}_4\text{Bi}_2\text{O}$ [J]. *Vacuum*, 2023, 212: 112008.
- [19] Fang W, Wei H, Xiao X, *et al.* XTlO ($X = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$): novel 2D semiconductors with high electron mobilities, ultra-low lattice thermal conductivities and high thermoelectric figures of merit at room temperature [J]. *Appl. Surf. Sci.*, 2022, 599: 153924.
- [20] Fang W Y, Chen Y, Ye P, *et al.* Elastic constants, electronic structures and thermal conductivity of monolayer XO_2 ($X = \text{Ni}, \text{Pd}, \text{Pt}$) [J]. *Acta Phys. Sin.*, 2021, 70: 246301 (in Chinese) [方文玉, 陈粤, 叶盼, 等. 二维 XO_2 ($X = \text{Ni}, \text{Pd}, \text{Pt}$) 弹性、电子结构和热导率 [J]. 物理学报, 2021, 70: 246301]
- [21] Lajevardipour A, Neek-Amal M, Peeters F M. Thermomechanical properties of graphene: valence force field model approach [J]. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2012, 24: 175303.
- [22] Efetov D K, Kim P. Controlling electron-phonon interactions in graphene at ultrahigh carrier densities [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 105: 256805.
- [23] Morelli D T, Jovovic V, Heremans J P. Intrinsically minimal thermal conductivity in cubic I-V-VI_2 semiconductors [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101: 035901.
- [24] Kudin K N, Scuseria G E, Yakobson B I. C_2F , BN, and C nanoshell elasticity from *ab initio* computations [J]. *Phys. Rev. B*, 2001, 64: 235406.
- [25] Min K, Aluru N R. Mechanical properties of graphene under shear deformation [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2011, 98: 013113.
- [26] Ding G, Gao G Y, Huang Z, *et al.* Thermoelectric properties of monolayer MSe_2 ($M = \text{Zr}, \text{Hf}$): low lattice thermal conductivity and a promising figure of merit [J]. *Nanotechnology*, 2016, 27: 375703.
- [27] Khan M, Kadam V, Sant T, *et al.* Growth of $\text{ZnO}/\text{Ga}_2\text{O}_3$ and $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{ZnO}$ heterostructures on $c\text{-Al}_2\text{O}_3$ substrate using pulsed laser deposition [J]. *Solid State Commun.*, 2023, 364: 115130.
- [28] Fang R H, Cui X Y, Stampfl C, *et al.* High mobility in α -phosphorene isostructures with low deformation potential [J]. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2020, 22: 2276.
- [29] Lang H F, Zhang S Q, Liu Z R. Mobility anisotropy of two-dimensional semiconductors [J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 94: 235306.
- [30] Cai Y Q, Zhang G, Zhang Y W. Polarity-reversed robust carrier mobility in monolayer MoS_2 nanoribbons [J]. *J. Am. Chem. Soc.*, 2014, 136: 6269.
- [31] Shao Z G, Ye X S, Yang L, *et al.* First-principles calculation of intrinsic carrier mobility of silicene [J].

- J. Appl. Phys.*, 2013, 114: 093712.
- [32] Liu P F, Bo T, Xu J P, et al. First – principles calculations of the ultralow thermal conductivity in two – dimensional group – IV selenides [J]. *Phys. Rev. B*, 2018, 98: 235426.
- [33] Hung N T, Nugraha A R T, Saito R. Designing high – performance thermoelectrics in two – dimensional tetradymites[J]. *Nano Energy*, 2019, 58: 743.
- [34] Naghavi S S, He J, Xia Y, et al. Pd₂Se₃ monolayer: A promising two – dimensional thermoelectric material with ultralow lattice thermal conductivity and high power factor[J]. *Chem. Mater.*, 2018, 30: 5639.
- [35] Matougui M, Bouadjemi B, Houari M, et al. Rattling-heusler semiconductors ’ thermoelectric properties: First – principles prediction [J]. *Chin. J. Phys.*, 2019, 57: 195.
- [36] Qi J, Dong B, Zhang Z, et al. Dimer rattling mode induced low thermal conductivity in an excellent acoustic conductor[J]. *Nat. Commun.*, 2020, 11: 5197.
- [37] Nag S, Saini A, Singh R, et al. Ultralow lattice thermal conductivity and anisotropic thermoelectric performance of AA stacked SnSe bilayer[J]. *Appl. Surf. Sci.*, 2020, 512: 145640.
- [38] Hong Y, Zhang J C, Zeng X C. Thermal conductivity of monolayer MoSe₂ and MoS₂ [J]. *J. Phys. Chem. C*, 2016, 120: 26067.
- [39] Sharma S, Singh N, Schwingenschlögl U. Two – dimensional tellurene as excellent thermoelectric material[J]. *ACS Appl. Energy Mater.*, 2018, 1: 1950.
- [40] Jiang P H, Liu H J, Cheng L, et al. Thermoelectric properties of gamma – graphyne from first – principles calculations[J]. *Carbon*, 2017, 113: 108.
- [41] Gao Z, Liu G, Ren J. High thermoelectric performance in two – dimensional tellurium: an *ab initio* study[J]. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2018, 10: 40702.
- [42] Xu H, Wan H, Xu R, et al. Enhancing the thermoelectric performance of SnTe – CuSbSe₂ with an ultra – low lattice thermal conductivity[J]. *J. Mater. Chem. A*, 2023, 11: 4310.
- [43] Shu Z, Wang B, Cui X, et al. High – performance thermoelectric monolayer γ – GeSe and its group – IV monochalcogenide isostructural family[J]. *Chem. Eng. J.*, 2023, 454: 140242.
- [44] Sheng X, Rao X, Liu C, et al. NaCuX (X = Se, Te): novel 2D materials simultaneously with ultra – low thermal conductivity and high thermoelectric figure of merit [J]. *Mater. Today Commun.*, 2023, 35: 105987.