



福建师范大学 物理与能源学院  
FUJIAN NORMAL UNIVERSITY College of Physics and Energy

福建省太阳能转换与储能工程技术研究中心

Fujian Provincial Engineering Technology Research Center of Solar Energy Conversion and Energy Storage

福建省量子调控与新能源材料重点实验室

Fujian Provincial Laboratory of Quantum Manipulation and New Energy Materials

学院首页

学院概况

本科教育

研究生教育

学科建设

科学研究

招生就业

党团工作

校友之窗

院务公开

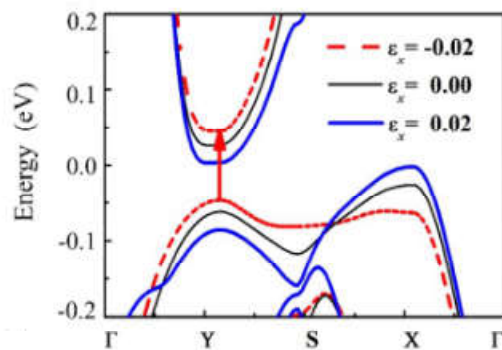
图书资料

## 近期，我院教师杨艳敏副教授、张健敏副教授、黄志高教授等的研究成果在《Journal of Physics: Condensed Matter》上发表

时间: 2020-02-01 浏览: 553

近期，我院杨艳敏副教授、张健敏副教授、黄志高教授等的研究成果Strain-engineered indirect-direct band-gap transitions of PbPdO<sub>2</sub> slab with preferred (0 0 2) orientation在《Journal of Physics: Condensed Matter》上发表。

近年来，受石墨烯独特电子性质探索的启发，对其他二维材料的研究越来越受到的关注，如金属二卤代烃、硒化铟和黑色磷烯等，其中层状过渡金属氧化物PbPdO<sub>2</sub>因具有独特的电子结构和在室温下较大热电功率，而在电子器件中具有广阔的应用前景。本文利用第一原理计算，系统地研究了取向为(0 0 2)的PbPdO<sub>2</sub>材料电子结构的应变效应。计算结果表明，PbPdO<sub>2</sub>超薄板具有较小的间接间隙，当施加2%的压缩或拉伸应变时，发生间接-直接带隙过渡。在此基础上，利用不同价带处的电荷密度差，详细分析了这种应变诱导的间接带隙跃迁。在应变作用下，由于Pd-O键的键长和键角的变化，导致了电荷转移和电荷极化的能量势垒。值得注意的是，对于(0 0 2)择优取向PbPdO<sub>2</sub>材料，电子和空穴沿x轴方向的预测载流子移动率分别为 $11\ 645.31\ \text{cm}^2\ \text{V}^{-1}\ \text{s}^{-1}$ ，y轴方向的预测载流子移动率分别为 $935.05\ \text{cm}^2\ \text{V}^{-1}\ \text{s}^{-1}$ 和 $16.05\ \text{cm}^2\ \text{V}^{-1}\ \text{s}^{-1}$ 。计算出的沿x轴方向的电子能动性比二维MoS<sub>2</sub> ( $\sim 400\ \text{cm}^2\ \text{V}^{-1}\ \text{s}^{-1}$ )的电子能动性大，与InSe ( $10^3\ \text{cm}^2\ \text{V}^{-1}\ \text{s}^{-1}$ )和黑色磷( $10^3 - 10^4\ \text{cm}^2\ \text{V}^{-1}\ \text{s}^{-1}$ )的电子能动性相当。结果表明(0 0 2)取向的高迁移率PbPdO<sub>2</sub>材料是一种理想的电子器件应用材料，这对未来PbPdO<sub>2</sub>的实际应用提供了参考。



(0 0 2)取向 PbPdO<sub>2</sub> 的能带结构随 x 方向应变的直接-间接带隙转变

官网链接: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-648X/ab2dad>

版权所有 © 福建师范大学物理能源学院 | 地址: 福建省福州市大学城科技路1号福建师范大学旗山校区(350117)

闽ICP备05000146号 | 闽公网安备 35010402350565号