

# “X-AlN ( $X = \text{C}, \text{Si}, \text{TC}$ )半导体的可见光调控与反常热输运” 补充材料

赵罡<sup>1)</sup> 梁汉普<sup>2)</sup> 段益峰<sup>1)\*</sup>

1) (中国矿业大学材料与物理学院, 徐州 221116)

2) (北京计算科学研究中心, 北京 100193)

## 目录

图 S1 稳定的 Ge-, Sn-与 Pb-AlN 结构与其声子谱

图 S2 孔状皱面 AlN 与 X-AlN ( $X = \text{C}, \text{Si}$  与 TC)的声子谱及其态密度

图 S3 孔状皱面 AlN 与 X-AlN ( $X = \text{C}, \text{Si}$  与 TC)在 800 K 下的分子动力学

图 S4 C-AlN 与 Si-AlN 在(a), (b) 8%拉伸应变下各键长变化与(c), (d)在应变调控下的 N-N 键长变化

图 S5 C-AlN 与 Si-AlN 在 0%, 4%与 8% (5%)下的(a), (b)散射率与(c), (d)群速度

表 S1 稳定的 Ge-, Sn-与 Pb-AlN 结构的原子序数、原子质量、晶格常数、键角与 X-Al 键长

表 S2 X-AlN ( $X = \text{C}, \text{Si}$  与 TC)在 0%, 4%与 5/8%拉伸应变下 4 个键(见图 6 与图 S1)的键长( $L$ )与键强( $S$ )

# Supplementary Material of “Absorption Modulation and Anomalous Thermal Transport in X-AlN(X=C,Si,TC) Semiconductor”

Zhao Gang<sup>1)</sup> Liang Han-Pu<sup>2)</sup> Duan Yi-Feng<sup>1)†</sup>

1) (*School of Materials and Physics, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, China*)

2) (*Beijing Computational Science Research Center, Beijing 100193, China*)

## Content

Figure S1. Crystal structures and phonon spectra of stable Ge-, Sn-, and Pb-AlN.

Figure S2. Phonon spectra and its phonon density of states for porous buckled AlN and X-AlN (X=C, Si and TC).

Figure S3. AIMD at 800 K for porous buckled AlN and X-AlN (X=C, Si and TC).

Figure S4. (a), (b) Variation of each bond length at 8% tensile strain and (c), (d) N-N bond length versus modulation of strain of C-AlN and Si-AlN.

Figure S5. (a), (b) Scattering rates and (c), (d) group velocity of C/Si-AlN at 0%, 4%, and 5%/8% tensile strain.

Table S1. Atomic Number, standard atomic weight, lattice constant, bond angle, and X-Al bond length of stable Ge-, Sn-, and Pb-AlN structures.

Table S2. Bond length ( $L$ ) and bond strength ( $S$ ) for four bonds (see Figures 6 and S1) at 0%, 4%, and 5/8% tensile strain in X-AlN (X=C, Si and TC).

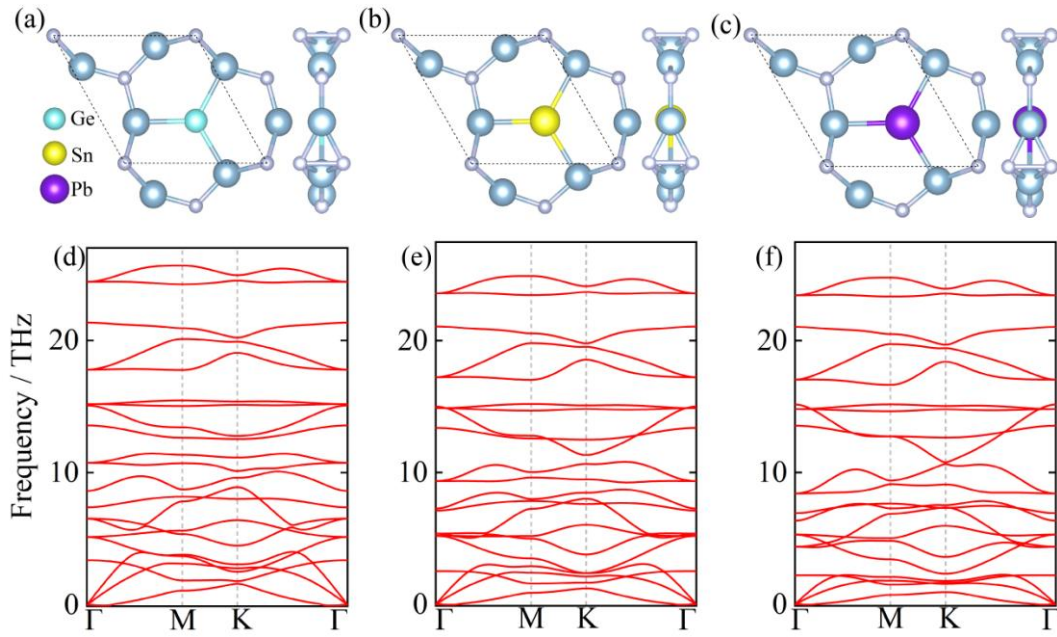


图 S1 稳定的 Ge-, Sn-与 Pb-AIN 结构与其声子谱

Fig. S1. Crystal structures and phonon spectra of stable Ge-, Sn-, and Pb-AIN.

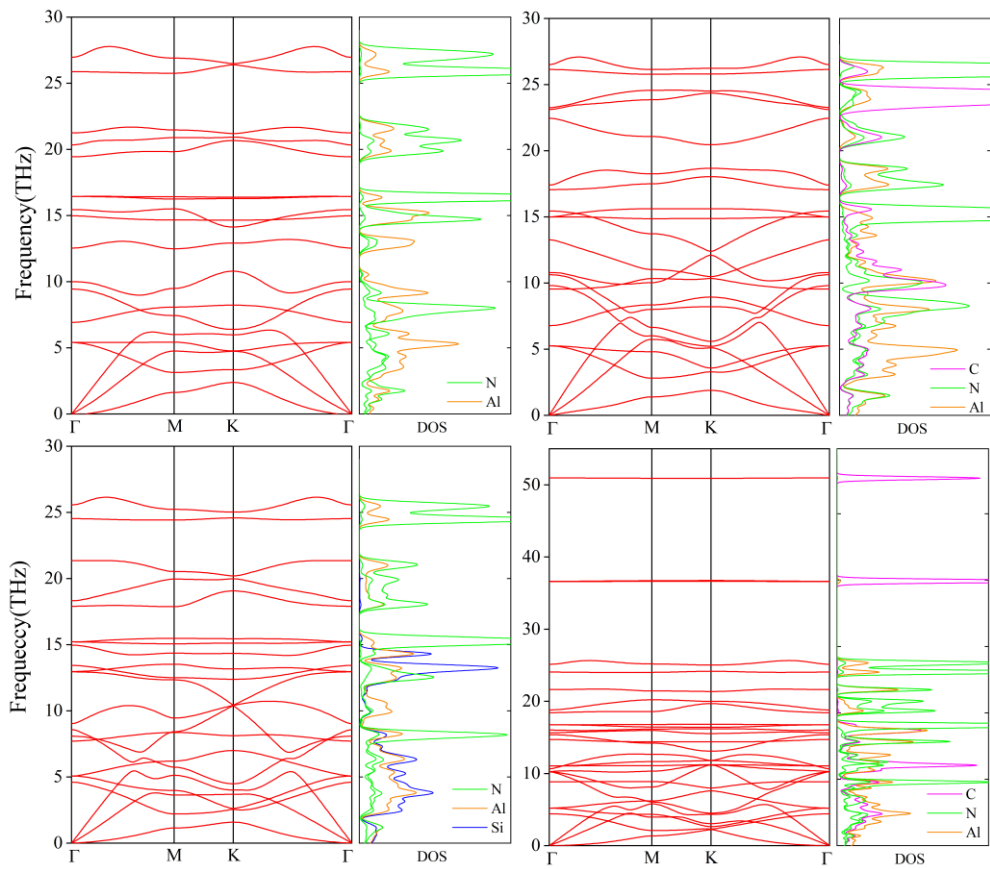


图 S2 孔状皱面 AlN 与 X-AlN (X=C, Si 与 TC)的声子谱及其态密度

Fig. S2. Phonon spectra and its phonon density of states for porous buckled AlN and X-AlN (X=C, Si and TC).

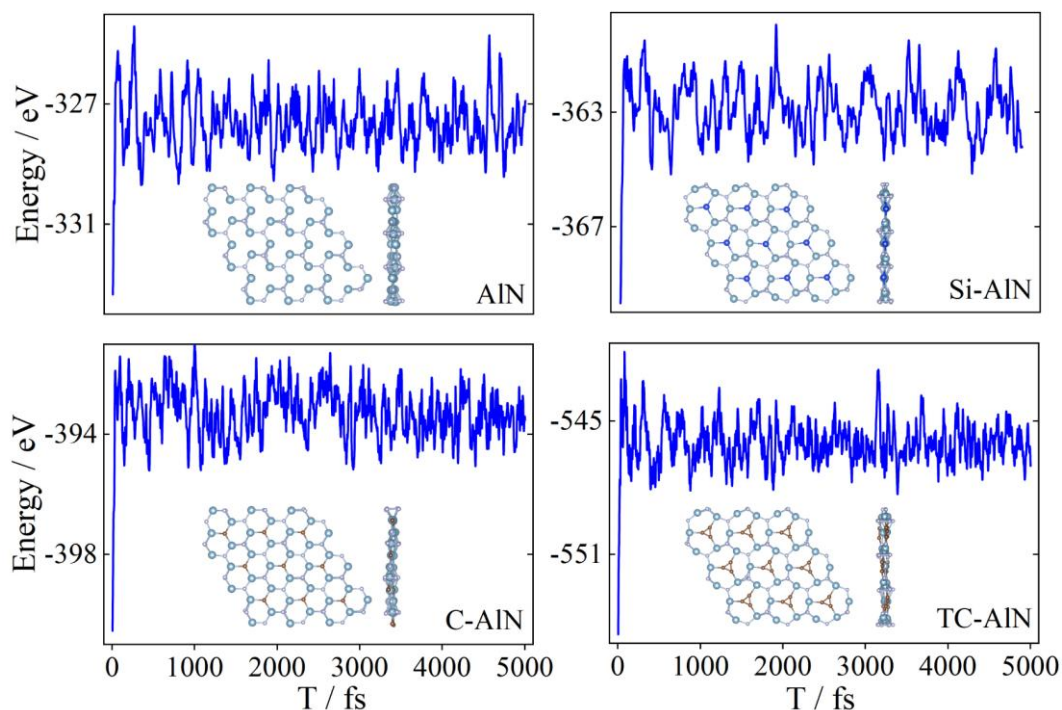


图 S3 孔状皱面 AlN 与 X-AlN (X=C, Si 与 TC) 在 800 K 下的分子动力学  
 Fig. S3. AIMD at 800 K for porous buckled AlN and X-AlN (X=C, Si and TC).

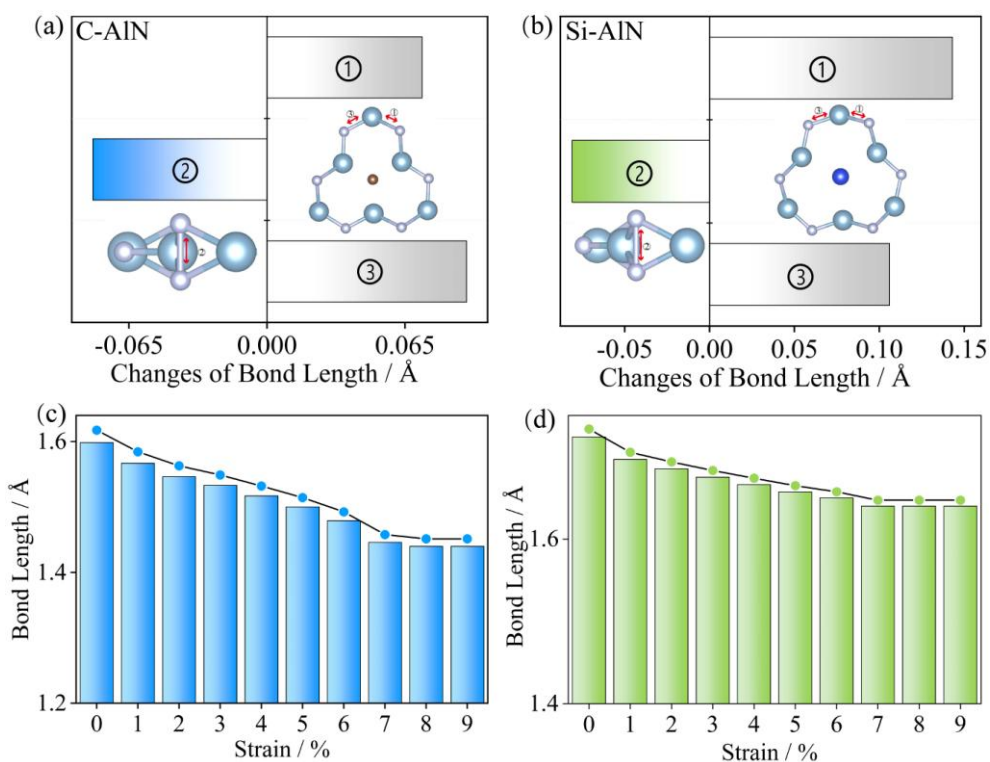


图 S4 C-AlN 与 Si-AlN 在(a), (b) 8% 拉伸应变下各键长变化与(c), (d) 在应变调控下的 N-N 键长变化  
 Fig. S4. (a), (b) Variation of each bond length at 8% tensile strain and (c), (d) N-N bond length versus modulation of strain of C-AlN and Si-AlN.

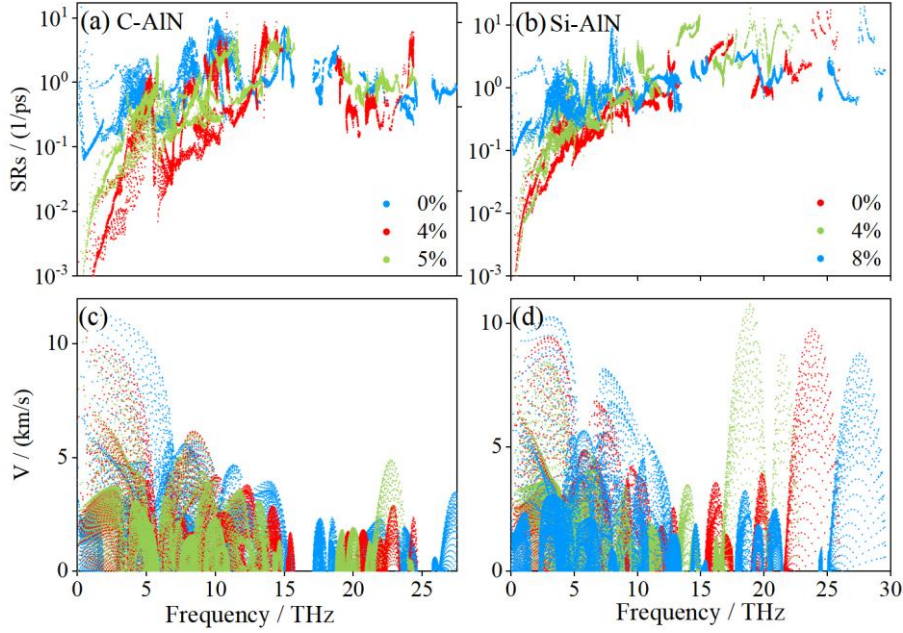


图 S5 C-AlN 与 Si-AlN 在 0%, 4% 与 8% (5%) 下的 (a), (b) 散射率与 (c), (d) 群速度

Fig. S5. (a), (b) Scattering rates and (c), (d) group velocity of C/Si-AlN at 0%, 4%, and 5/8% tensile strain.

表 S1 稳定的 Ge-, Sn-与 Pb-AlN 结构的原子序数、原子质量、晶格常数、键角与 X-Al 键长

Table S1. Atomic Number, standard atomic weight, lattice constant, bond angle, and X-Al bond length of stable Ge-, Sn-, and Pb-AlN structures.

	原子序数	原子质量( $m^0$ )	晶格常数(Å)	键角 $\alpha$ (°)	键长(Å)
Ge-AlN	32	72.63	5.91	139.61	2.48
Sn-AlN	50	118.71	6.05	144.92	2.66
Pb-AlN	82	207.20	6.08	146.67	2.72

表 S2 X-AlN (X=C, Si 与 TC) 在 0%, 4% 与 5%/8% 拉伸应变下 4 个键 (见图 6 与图 S1) 的键长(L) 与键强(S)

Table S2. Bond length ( $L$ ) and bond strength ( $S$ ) for four bonds (see Figure 6 and Figure S1) at 0%, 4%, and 5%/8% tensile strain in X-AlN (X=C, Si and TC).

	C-AlN				Si-AlN				TC-AlN				
	1	2	3		1	2	3		1	2	3		4
	$L$	$L$	$L$	$S$	$L$	$L$	$L$	$S$	$L$	$L$	$L$	$S$	$L$
0%	1.80	1.95	1.60	1.78	1.82	1.93	1.72	1.51	1.84	1.92	1.75	1.20	1.39
4%	1.86	2.02	1.53	2.13	1.89	1.98	1.68	1.57	1.93	1.98	1.69	1.25	1.40
8% (5%)	1.88	2.04	1.52	2.29	1.97	2.03	1.64	1.59	2.03	2.04	1.67	1.26	1.41