

科教融合下计算机模拟实验教学设计

——以电场作用下的 Z 型异质结电子结构调节为例

崔永鑫 王亚娇 张丽丽

伊犁师范大学 物理科学与技术学院, 新疆 伊宁 835000

[摘要] 本论文探讨了在科教融合背景下, 以 Z 型异质结电子结构调节为例, 设计了一项计算机模拟实验的教学方案。通过将科学知识与实践教学相结合, 旨在提升学生的学习兴趣和创新力。论文首先介绍了计算机模拟实验的优势, 强调其在理解复杂物理和化学概念方面的重要性。接着, 实验部分设定了四个主要目标, 包括了解第一性原理计算机模拟、理解 Z 型异质结的电子结构特征、探索电场对其电子结构的影响, 以及掌握使用 VASP 软件进行材料计算的技能。研究通过构建 GaN/C₃N₄ 异质结模型, 分析其电子结构和电子迁移机制, 发现 Z 型异质结在光电器件和催化反应中具有优良的性能。最后, 论文提出了基于实验的教学建议, 强调理论与实践结合、小组合作和多媒体教学的重要性, 以帮助学生深入理解 Z 型异质结的电子结构及其调节机制, 为未来的学习和研究奠定基础。

[关键词] 科教融合; 计算机模拟实验; Z 型异质结

DOI: 10.33142/fme.v6i1.14948

中图分类号: G642

文献标识码: A

Teaching Design of Computer Simulation Experiment for the Integration of Science and Education — Taking the Adjustment of Z-type Heterojunction Electronic Structure under the Action of Electric Field as an Example

CUI Yongxin, WANG Yajiao, ZHANG Lili

College of Physical Science and Technology, Yili Normal University, Yining, Xinjiang, 835000, China

Abstract: This paper explores a teaching plan for computer simulation experiments using Z-type heterojunction electronic structure regulation as an example in the context of the integration of science and education. By combining scientific knowledge with practical teaching, the aim is to enhance students' interest in learning and innovation ability. The paper first introduces the advantages of computer simulation experiments, emphasizing their importance in understanding complex physical and chemical concepts. Subsequently, the experimental section set four main objectives, including understanding first principles computer simulations, comprehending the electronic structural characteristics of Z-type heterojunctions, exploring the influence of electric fields on their electronic structures, and mastering the skills of using VASP software for material calculations. By constructing a GaN/C₃N₄ heterojunction model and analyzing its electronic structure and electron migration mechanism, it was found that Z-type heterojunctions have excellent performance in optoelectronic devices and catalytic reactions. Finally, the paper proposes teaching suggestions based on experiments, emphasizing the importance of combining theory with practice, group cooperation, and multimedia teaching to help students gain a deeper understanding of the electronic structure and regulatory mechanisms of Z-type heterojunctions, laying a foundation for future learning and research.

Keywords: integration of science and education; computer simulation experiment; Z-type heterojunction

引言

在当今教育改革的大潮中, 科教融合已成为提升教学质量和培养学生综合素质的重要途径。将科学知识与实践教学相结合的授课方式, 不仅能够激发学生的学习兴趣, 还能培养其创新思维和实践能力。特别是在计算机模拟实验领域, 这种融合显得尤为重要^[1-4]。

计算机模拟实验作为一种现代教学手段, 以其直观、高效的特点, 在教育领域得到了广泛应用。它不仅能够模拟真实世界的物理和化学过程, 还能够帮助学生更好地理解抽象的科学概念。在科教融合的框架下, 计算机模拟实

验为教学设计提供了新的思路和方法^[5]。

以 Z 型异质结的教学为例, 这一复杂的半导体结构通常让学生感到难以理解和掌握。然而, 通过计算机模拟实验, 可以直观地展示 Z 型异质结的形成过程、电子和空穴的传输路径, 以及其在光电转换中的应用。这种教学方式不仅有助于学生深入理解 Z 型异质结的工作原理, 还能激发他们的探索精神和创新意识^[6]。

在教学设计中, 教师可以结合具体案例, 通过情境教学法、小组合作探究法等教学方法, 引导学生主动参与到计算机模拟实验中。例如, 可以设置一系列与 Z 型异质结

相关的探究性问题，如“如何优化 Z 型异质结的结构以提高光催化效率？”等，让学生在解决问题的过程中，逐步掌握相关知识。

此外，科教融合还强调跨学科知识的整合与应用。在 Z 型异质结的教学中，可以将其与物理学、化学、材料科学等多个学科的知识相结合，形成一个综合性的知识体系。通过跨学科的教学设计，不仅可以拓宽学生的知识面，还能培养他们的跨学科思维能力和解决实际问题的能力。

综上所述，科教融合背景下的计算机模拟实验为 Z 型异质结的教学提供了新的思路和方法。通过直观、高效的教学方式，结合跨学科知识的整合与应用，以及现代信息技术手段的辅助，可以帮助学生更好地理解和掌握 Z 型异质结的相关知识，同时培养他们的创新思维和实践能力。这种教学模式不仅有助于提升教学质量，还能为学生的未来发展奠定坚实的基础。

1 实验部分

1.1 实验目的

- (1) 初步了解第一性原理计算机模拟基本原理；
- (2) 理解 Z 型异质结的电子结构电子迁移理论特征；
- (3) 探索电场对 Z 型异质结电子结构的影响；
- (4) 学会使用计算机模拟软件 VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) 进行材料的第一性原理计算。

1.2 实验原理

第一性原理计算机模拟材料设计是指基于量子力学基本原理，利用计算机模拟技术对材料的性质和行为进行深入研究的方法。该方法通过解决薛定谔方程，以第一性原理为基础，能够准确描述材料的电子结构、晶体结构及其相互作用。近年来，随着计算能力的提升和算法的改进，第一性原理计算在新材料研发中发挥了重要作用，尤其在催化剂、半导体和超导材料等领域展现出巨大潜力，推动了材料科学的快速发展。因此，本实验教学以满足培养材料设计人才的需求为宗旨，构建教学科研融合型材料电子结构调节教学设计，本实验选用 GaN/g-C₃N₄Z 型异质结电子结构开展实验教学是基于以下几点：

(1) 优良的能带结构调控：GaN/g-C₃N₄Z 型异质结通过选择合适的半导体材料组合，可以实现能带结构的调节。这种调控有助于优化光吸收、电子转移和能量转换效率，在光电器件如太阳能电池和光催化中表现优异。

(2) 高效的光电性能：GaN/g-C₃N₄Z 型异质结通常能实现优良的光电响应，其结构优势可以协助提高光的吸收及电子的分离效率，减少复合损失。这对提高光电转化效率至关重要。

(3) 模拟灵活性：计算机模拟可以在不同的操作条件下，细致地探讨 Z 型异质结的电子结构特性，如能带弯曲、电子和空穴的迁移率等。这种灵活性使得研究人员能

够快速评估不同材料组合的潜力。

因此本实验主要围绕 Z 型异质结电子结构在电场下的调节展开探索式教学，实验原理主要包括两部分：第一性原理计算机模拟方法；Z 型异质结的电子结构及电子迁移理论机制。以下将逐一简单介绍：

1.2.1 第一性原理计算机模拟方法

第一性原理计算机模拟方法 (First Principles Simulation) 是一种基于量子力学基本原理进行材料、分子和化学反应的计算技术。它通过解决量子力学的基本方程，尤其是 Schrödinger 方程，来预测物质的性质和行为，而不依赖于经验参数或实验数据。

在第一性原理计算中，常用的方法包括密度泛函理论 (DFT)、哈特里-福克方法 (HF) 等。密度泛函理论是最广泛使用的第一性原理方法之一，它通过电子密度而非波函数来描述多电子系统，极大地减少了计算复杂度，使得对大规模系统的研究变得可行。DFT 能够有效计算凝聚态物质的基态性质，如晶体结构、能带结构和电子态密度等。

第一性原理计算的强大之处在于其高度的预测能力和准确性，能够揭示材料的微观机制，辅助材料设计和优化。它广泛应用于材料科学、化学、物理以及生物学等多个领域。例如，在催化剂的设计中，第一性原理方法可以用来探索反应机制并优化催化活性；在半导体材料研究中，能够预测材料的能带结构和电学性能。

尽管第一性原理计算具有显著的优势，但也存在一定的局限性。计算需求高、计算时间长以及对计算资源的消耗等都是其挑战所在。新兴的机器学习和高性能计算技术正在推动第一性原理计算的进步，使得其在实际应用中越来越普及。

总之，第一性原理计算机模拟方法为理解和预测材料行为提供了强有力的工具，对科学研究和工业应用都有着重要的影响。

1.2.2 Z 型异质结的电子结构与电子迁移理论机制

Z 型异质结 (Z-type heterojunction) 是一种重要的电子结构设计，主要用于光电器件和催化反应领域。它通过在半导体材料的界面上形成特定的能带结构，以促进电子和空穴的分离及迁移。下面是 Z 型异质结中电子迁移的理论机制的简要介绍：

(a) 结构特点

Z 型异质结通常由两种或多种具有不同能带结构的半导体材料组合而成，这些材料在能带位置上形成梯度，使得电子和空穴在界面处可以被有效分离。这种结构有助于提升光电转化效率。

(b) 能带对齐

Z 型异质结的核心在于能带对齐，即异质结内的两种异质物的导带底和价带顶都相对于电子自由能级排列。有利于分析其是否同时具有析氢和析氧的能力。通过选择合

适的材料，形成所需的能带结构，以确保在光照下产生的电子（负载）向导带迁移，而空穴（正载）向价带迁移，降低复合几率。

(c) 光激发过程

在光照作用下，电子从价带激发到导带，形成电子-空穴对。在 Z 型异质结中，由于其特殊的电子结构，电子会优先迁移至导带，而空穴则会向价带迁移。在理想情况下，电子和空穴会沿着不同的路径分离并迁移到不同的电极或催化剂表面。

(d) 电子迁移机制

在外加电场的影响下，电子会被驱动向导带迁移，而空穴则向价带迁移。材料界面的缺陷和界面状态可能成为电子和空穴迁移的捕获中心，对电子迁移的效率产生影响。理想的 Z 型异质结可将这些缺陷保持在最低限度，以确保高效的载流子迁移。在不同材料间的界面，迁移率和界面态密度对整体电子迁移效率有重要影响，采用具有高电子迁移率的材料可以优化电子的迁移。

(e) 催化及光电应用

在催化反应中，Z 型异质结通过促进电子与反应物的有效接触，提升催化反应的速率。同样，在光电器件中，Z 型异质结可以显著提高光的吸收和电荷的分离效率，从而改善器件的整体性能。

Z 型异质结通过其特殊的结构设计，有效促进了电子与空穴的迁移。这种设计理念被广泛应用于先进材料的开发和光电器件的优化中，为提高能量转换效率提供了重要基础。

1.3 主要软件及参数设置

1.3.1 VASP 软件

本教学设计中所使用的第一性计算机模拟软件是 VASP，这是一款由维也纳大学 Hafner 小组开发的电子结构计算和量子力学-分子动力学模拟软件包，广泛应用于材料模拟和计算物质科学研究。

1.3.2 主要参数设置

本实验采用 VASP 模拟软件包 (Vienna Ab-initio Simulation Package)，应用密度泛函理论 DFT (Density functional theory) 的缀加平面波赝势法进行研究，利用广义梯度近似 GGA (general gradient approximate) 并选取 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 作为交换关联函数进行计算，在计算过程中，采用 TS (Tkatchenko-Scheffler) 和 DFT-D3 方法，选取平面波截断能 (Ecut) 为 500eV，根据 Monkhorst-Pack 方案，选取 K 网格点为 3×3×1，能量收敛精度 (SCF) 设置为 2×10⁻⁶eV/atom。

1.4 实验教学内容

1.4.1 建立 Z 型异质结模型

本实验构建了的 GaN/g-C₃N₄ 模型，共包含 46 个原子

(如图 1 所示)。首先，沿 g-C₃N₄ 和 GaN 的 (001) 晶面切割出二维 g-C₃N₄ (a=b=4.779 埃) 和 GaN (a=b=3.210 埃)。然后，基于晶格匹配，将两种相的单层扩展为 g-C₃N₄ (2×2×1) 和 GaN (3×3×1)，最终构建了一个以 g-C₃N₄ 为底的异质结。为了有效减轻层间耦合的影响，特意在 c 轴方向添加了一个厚度为 20 埃的较大真空层。

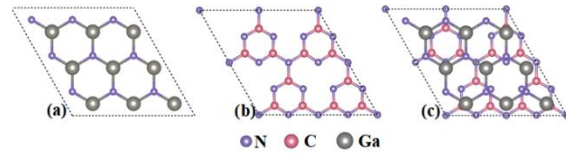


图 1 结构模型俯视图 (a) GaN 超晶胞的, (b) g-C₃N₄ 超晶胞, (c) GaN/g-C₃N₄

1.4.2 计算基础电子结构

本实验对单层 g-C₃N₄、单层 GaN 以及 GaN/g-C₃N₄ 的能带结构和电子态密度进行了全面分析，如图 2-3 所示。基于所提供的数据，本实验重点关注从 -3 eV 到 5 eV 的能量范围，以费米能级 (eV) 为参考点。此外，这两个系统的导带最低点和价带最高点都位于对称点 Γ ，表明这两个体系都是直接跃迁型能带。此外，计算表明，单层 GaN 具有 2.146 eV 的带隙宽度 (E_g)。相反，单层 g-C₃N₄ 的带隙较窄，为 1.568 eV。右侧的电子态密度 (DOS) 图提供了证据，表明单层 GaN 的价带主要由 N-2p 态组成，Ga-4p 态的贡献较小。此外，单层 GaN 的导带和部分价带主要受 N-2s 态的影响，这与在其对应的能带结构图中观察到的现象一致。

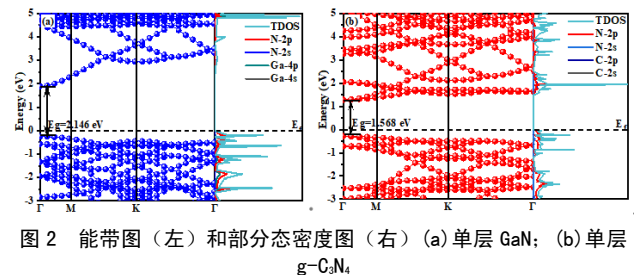


图 2 能带图 (左) 和部分态密度图 (右) (a) 单层 GaN; (b) 单层 g-C₃N₄

图 3(a) 展示了 GaN/g-C₃N₄ 的能带结构图，其中价带顶 (VBM) 和导带底 (CBM) 在 Γ 点处重合，表明其具有直接带隙特性，能量值为 1.842 eV。GaN/g-C₃N₄ 的导带底主要由 g-C₃N₄ 贡献，而价带顶主要由 GaN 贡献，表明 GaN/g-C₃N₄ 具有类型 II 的带隙排列。与单层系统相比，GaN/g-C₃N₄ 中的两种材料虽然存在重叠，但仍然保持各自独立的电子结构。在这个过程中，不同材料的组合使得可以利用互补优势并优化性能。此外，异质结界面的相互作用显著提高了分离光生载流子的效率。异质结的导带主要由费米能级附近的 C-2p 和 N-2p 态贡献，而价带则主要由 N-2p 和 Ga-4p 态组成，如图 3(b) 所示。异质结的导带主要由费米能级附近的 C-2p 和 N-2p 态贡献，而价带则主要由 N-2p 和 Ga-4p 态组成，如图 3(b) 所示，这可以归因于价带与费米能

级的接近,促进了电子从价带到导带的跃迁。此外,两种材料的轨道之间存在能量级重叠,表明Ga原子和N原子的轨道之间存在显著的轨道杂化,这促进了Ga-4p态电子向N-2p态的转移,从而在异质界面处的N原子上积累电子。

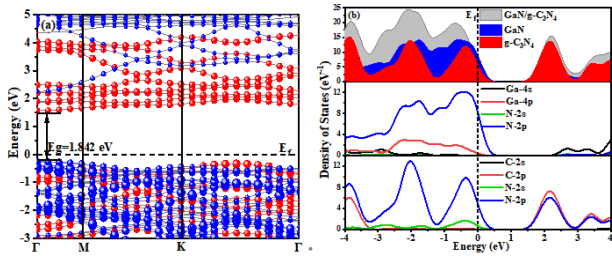


图3 GaN/g-C₃N₄异质结:(a)能带结构示意图;(b)密度态密度示意图

1.4.3 应用电场的影响

大量的研究已经证明,异质结结构的带隙和性质可以通过外加电场进行调节。因此,本实验在GaN/g-C₃N₄平面表面的c方向上引入垂直于平面的外电场。图4(a)显示了水氧化还原过程中GaN/g-C₃N₄的带边位置的变化,其中GaN和g-C₃N₄的价带顶(VBM)和导带底(CBM)利用公式确定: $E_{VBM} = x - E_{elec} + 0.5 E_g$, $E_{CBM} = E_{VBM} - E_g$ 其中, E_{elec} 表示相对于H电极的常数($E_{elec} = 4.5 \text{ eV}$), E_g 表示系统的带隙, x 表示系统中各成分原子的平均电负性。根据方程的求解结果,在-0.1 V/A至0.2 V/A的电场范围内,g-C₃N₄的CBM水平高于GaN,同时维持较低的VBM。上述观察表明,GaN/g-C₃N₄具有交错的能带结构。此外,GaN/g-C₃N₄的带隙高于H⁺/H₂的电位,而价带顶则位于O₂/H₂O电位之下。上述特性表明,GaN/g-C₃N₄可以归类为一种二型异质结。当电场强度低于-0.1 V/A或超过0.2 V/A时,GaN/g-C₃N₄仍然具有不规则的能带结构。然而,GaN/g-C₃N₄的导带底和价带顶并未完全位于氧化还原电位的上下两侧。因此,在电场强度 $E \leq -0.1 \text{ V/A}$ 或 $E > 0.2 \text{ V/A}$ 时,GaN/g-C₃N₄不是二型异质结,而是Z型异质结。

随后,以施加特定的电场强度($E = -0.2 \text{ V/A}$)下的GaN/g-C₃N₄结构为例,阐明了这种Z型异质结的内在机制。基于上述分析,显而易见的是,GaN/g-C₃N₄结构具有带隙跨越特性,如图4(b)(i)所示,这表明其具有作为II型异质结的潜力。然而,g-C₃N₄的VBM位于水氧化电位之上,从而阻碍了GaN VBM中的空穴向g-C₃N₄的转移,使其无法满足水解所需的条件。由此可知此处GaN/g-C₃N₄并非II型异质结,而可能是新型的Z型异质结。因此,如图4(b)(ii)所示,电子转移路径从GaN的CBM(较低的还原电位)转移到g-C₃N₄的VBM(较低的氧化电位),沿着特定的“Z”型路径进行,促进了载流子复合。同时,g-C₃N₄的CBM处具有较高还原能力的电子和GaN的VBM处具有较高氧化能力的空穴被有选择地保留下来,从而促进了氧化还原位点的有效空间分离,提高了异质结在光催化反应中

的活性。这种新的电子迁移机制被称为直接Z型结构。根据这种方法,在特定的电场($E \leq -0.1 \text{ V/A}$, $E > 0.2 \text{ V/A}$)下,如图4(a)所示,所有GaN/g-C₃N₄系统中都会形成Z型异质结。

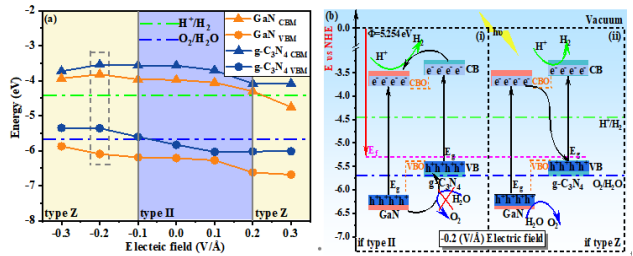


图4 (a)示意图说明了在水氧化和还原过程中,GaN/g-C₃N₄的带边位置在顺序外部电场的影响下的变化;(b)示意图说明了在应用电场强度为-0.2 V/A时,异质结带边对齐后光催化电子迁移机制。真空能级被定义为零电子伏特,绿色虚线表示氧化电位,蓝色虚线表示还原电位

图5所示的Z型异质结相比II型异质结具有显著的红移现象。Z型异质结的红移和吸收系数在0.2 V/A和0.1 V/A的外加电场强度下显著增强。这一观察结果与之前对Z型GaN/g-C₃N₄体系的全面讨论相吻合,其中其优越的氧化还原能力作为增强光吸收和改善光催化活性的关键因素脱颖而出。

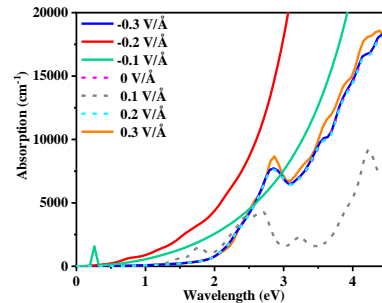


图5 在不同外部电场的影响下,GaN/g-C₃N₄异质结的吸收光谱,实线表示Z型异质结,虚线表示II型异质结

1.4.4 计算机模拟实验结果分析与讨论

本实验采用第一性原理分析方法研究了GaN/g-C₃N₄异质结在外部电场下的电子结构和光学性能。计算结果表明,GaN/g-C₃N₄异质结具有1.842 eV的直接带隙,并具有II型异质结结构。电子从GaN层迁移到g-C₃N₄层,从而在垂直于GaN层方向上形成一个内建电场。当施加的外部电场强度低于0.1 V/A或超过0.2 V/A时,GaN/g-C₃N₄的能带结构可以从II型异质结转变为Z型异质结。与II型材料相比,Z型材料具有更高的光生电子潜力,从而增强其还原能力。此外,它与II型材料相比时具有较低的空穴潜力,从而增强其氧化能力。在外加电场强度分别为0.2 V/A和0.1 V/A时,Z型异质结的红移和吸收系数均发生显著增强。总之,精确控制外加电场可以显著影响和优化这些异质结的能带结构和光催化性能。

2 实验安排和教学建议

首先要理论与实践结合,主要是通过将理论知识与计算机模拟相结合,增强学生的理解与应用能力。在每个实验环节后进行讨论,加深学生的概念理解。其次要加强小组合作,鼓励学生组成小组,共同进行模型构建和数据分析,促进团队合作及学术讨论。再次引导性提问,在实验过程中,提出一些引导性问题,促使学生思考电场如何影响电子载流子的行为及其在实际应用中的意义。最后,要加强反思与反馈,在课程结束后,收集学生的反馈,评估课程的有效性和学生的学习体验,适时调整教学安排,提高教学质量。通过这样的实验安排和教学建议,学生能够更深入地理解 Z 型异质结的电子结构及其调节机制,为未来的学习和研究打下坚实的基础。具体教学实践环节设计详见表 1。

表 1 教学实践环节设计

课程安排	完成内容	课时安排
1. 课前准备	教师公布实验内容,完成分组	1 课时
2. 理论准备	介绍 Z 型异质结的工作原理、基本构造及用途。	1 课时
	电子结构的相关理论:讲解能带理论、电子-空穴对的生成与分离机制,电场对电子分布的影响。	
3. 软件工具学习	VASP 简介:介绍使用软件进行第一性原理计算的基本流程。	1 课时
	模拟设置:教授如何构建模型、选择交换-关联泛函、设置计算参数(如能量截止、k 点网格等)。	
4. 实验步骤	实验 1: 建立 Z 型异质结模型	1 课时
	使用 VASP 等软件建立 Z 型异质结模型,选择合适的材料组合(如 GaN 和 g-C ₃ N ₄),并确定其晶胞参数。	
	实验 2: 计算基础电子结构	1 课时
	进行基态能量计算、几何优化,获取初始的电子结构,包括能带结构和态密度图,记录结果。	
	实验 3: 应用电场的影响	1 课时
	在模型上施加外部电场,设置不同的电场强度(如 0.0 V/Å, 0.1 V/Å, 0.2 V/Å)。重新计算电子结构,观察和记录其变化。	
	实验 4: 结果分析与讨论	1 课时
分析电场作用下的能带结构变化、载流子分布和电子迁移情况。撰写实验报告,总结结果与理论知识的结合,讨论实验过程中遇到的问题及其解决方案。		
5. 成果交流	任务组汇报及成绩评定	1 课时

3 结论

本论文探讨了在科教融合背景下,利用计算机模拟实验教学设计 Z 型异质结的电子结构调节。论文首先介绍了

科教融合的重要性,强调计算机模拟实验在教育中的应用,尤其是在理解复杂的物理和化学概念方面的优势。以 Z 型异质结为例,计算机模拟能够直观展示其形成过程及电子迁移路径,从而帮助学生深入理解其工作原理。实验部分的设计包括四个主要目标:了解第一性原理计算机模拟的基本原理、理解 Z 型异质结的电子结构特征、探索电场对其电子结构的影响,以及掌握使用 VASP 软件进行材料计算的技能。论文详细阐述了第一性原理计算的基本原理、主要方法及其应用场景,指出该方法在材料设计中的高精度和可靠性。在 Z 型异质结的电子结构与电子迁移机制部分,论文分析了其结构特点、能带对齐、光激发过程及电子迁移机制,强调了 Z 型异质结在光电器件和催化反应中的重要性。通过对 GaN/C₃N₄ 异质结的模型构建与稳定性分析,研究表明该异质结在不同电场下的电子结构变化,揭示了其作为 Z 型异质结的潜力。最后,论文提出了实验安排和教学建议,强调理论与实践结合、小组合作、引导性问题的提出以及多媒体教学的使用,以提高学生的学习效果和兴趣。通过这样的教学设计,学生能够更深入地理解 Z 型异质结的电子结构及其调节机制,为未来的学习和研究奠定基础。综上所述,本论文为 Z 型异质结的教学提供了新的思路和方法,展示了计算机模拟实验在现代教育中的重要作用。

基金项目:伊犁师范大学大学教改项目(YSYB202271)。

[参考文献]

- [1]左彪,张旖芝,陈铮凯,等.强化学术牵引,深化科教融合:创新化学本科人才培养的探索与实践[J].大学化学,2024,39(11):38-43.
 - [2]丁珏,杨小权,胡国辉,等.深化科教融合与产教协同提升力学专业实践教育的实效性[J].高教学刊,2024,10(34):97-100.
 - [3]刘昊迪,衣学喜.基于科教融合的量子力学混合式教学探索与实践[J].高教学刊,2024,10(33):115-118.
 - [4]吴树伸.新质生产力视域下“科教融汇”创新发展实施路径研究[J].中国科技产业,2024(11):58-61.
 - [5]廖婷.物理教学中计算机模拟实验的灵活融入[J].中学物理教学参考,2018,47(16):57-58.
 - [6]Dai, M.-Y., Zhao, X.-C., Lei, B.-C.; Huang, Y.-N.; Zhang, L.-L.; Guo, H., Wang, H.-G. First Principle Study on the Z-Type Characteristic Modulation of GaN/g-C₃N₄ Heterojunction[J]. Molecules, 2024, 29(8): 5355.
- 作者简介:崔永鑫(2000—),女,满族,河北唐山人,伊犁师范大学物理科学与技术学院全日制专业硕士研究生在读,研究方向:学科教学(物理);*通信作者:张丽丽(1982—),女,汉族,江苏徐州人,博士,副教授,伊犁师范大学物理科学与技术学院,研究方向:凝聚态物理,物理学学科教育。