

应力调控BlueP/ X Te₂ ($X = \text{Mo}, \text{W}$)范德瓦耳斯异质结电子结构及光学性质理论研究

邢海英 郑智健 张子涵 吴文静 郭志英

Tunable electronic structure and optical properties of BlueP/ X Te₂ ($X = \text{Mo}, \text{W}$) van der Waals heterostructures by strain

Xing Hai-Ying Zheng Zhi-Jian Zhang Zi-Han Wu Wen-Jing Guo Zhi-Ying

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 067101 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201728

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201728>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Cu_xO共掺杂AlN晶体电子结构与光学性质研究

Electronic structure and optical properties of Cu–O co-doped AlN

物理学报. 2018, 67(4): 047101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172096>

含磷酸胍基间作用的磷酸双乙酸胍晶体电子结构与光学性质研究

Electronic structure and optical properties of phosphate bis-guanidinoacetate crystal containing guanidine phosphate interaction

物理学报. 2019, 68(6): 064210 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181627>

不同价态Mn掺杂InN电子结构、磁学和光学性质的第一性原理研究

First-principle study on electronic structures, magnetic, and optical properties of different valence Mn ions doped InN

物理学报. 2018, 67(8): 087501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172504>

(Cu,N)共掺杂TiO₂/MoS₂异质结的电子和光学性能:杂化泛函HSE06

Electronic and optical performances of (Cu, N) codoped TiO₂/MoS₂ heterostructure photocatalyst: Hybrid DFT (HSE06) study

物理学报. 2018, 67(23): 233101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181520>

第一性原理方法研究N-Pr共掺杂ZnO的电子结构和光学性质

Electronic and optical properties of n-pr co-doped anatase TiO₂ from first-principles

物理学报. 2019, 68(1): 017401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181531>

过渡金属(Cr, Mn, Fe, Co)掺杂对TiO₂磁性影响的第一性原理研究

First principle study of influence of transition metal (Cr, Mn, Fe, Co) doping on magnetism of TiO₂

物理学报. 2020, 69(19): 197101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200644>

应力调控 BlueP/ $X\text{Te}_2$ ($X = \text{Mo}, \text{W}$) 范德瓦耳斯异质结电子结构及光学性质理论研究*

邢海英^{1)3)†} 郑智健¹⁾ 张子涵¹⁾ 吴文静¹⁾ 郭志英^{2)‡}

1) (天津工业大学电子与信息工程学院, 天津 300387)

2) (中国科学院高能物理研究所, 北京同步辐射, 北京 100049)

3) (大功率半导体照明应用系统教育部工程研究中心, 天津 300387)

(2020年10月18日收到; 2020年11月21日收到修改稿)

通过第一性原理计算探讨了蓝磷烯与过渡金属硫化物 $\text{MoTe}_2/\text{WTe}_2$ 形成范德瓦耳斯异质结的电子结构和光学性质, 以及施加双轴应力对相关性质的影响. 计算结果表明, 形成 $\text{BlueP}/X\text{Te}_2$ ($X = \text{Mo}, \text{W}$) 异质结, 二者能带排列为间接带隙 type-II 并有较强的红外光吸收, 同时屏蔽特性增强. 随压缩应力增加, $\text{BlueP}/X\text{Te}_2$ 转变为直接带隙 type-II 能带排列最后转变为金属性; 随拉伸应力增加, 异质结转变为间接带隙 type-I 能带排列. 外加应力也能有效调控异质结的光吸收性质, 随压缩应力增加吸收边红移, 光吸收响应拓展至中红外光谱区且吸收系数增大; $\text{BlueP}/\text{MoTe}_2$ 较 $\text{BlueP}/\text{WTe}_2$ 在中红外至红外光区间表现出更强的光吸收响应; 静态介电常数 $\epsilon_1(0)$ 大幅增加. 结果表明, 压缩应力对 $\text{BlueP}/\text{MoTe}_2$ 和 $\text{BlueP}/\text{WTe}_2$ 能带排列、光吸收特性均有显著的调控作用, 其中 $\text{BlueP}/\text{MoTe}_2$ 对调控更敏感, 这些特性也使 $\text{BlueP}/X\text{Te}_2$ 异质结在窄禁带中红外半导体材料及光电器件具有令人期待的应用价值.

关键词: $\text{BlueP}/X\text{Te}_2$ ($X = \text{Mo}, \text{W}$) 异质结, 电子结构, 光学性质, 应力

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 79.60.Jv

DOI: 10.7498/aps.70.20201728

1 引言

石墨烯的成功制备改变了原有单原子材料在非绝对零度下不能稳定存在的传统认识^[1], 也激发了国内外学术界对二维层状材料的重点关注. 其中, 二维过渡金属硫族化合物 (TMDs) MX_2 ($M = \text{Mo}, \text{W}, X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$)^[2-4] 及其与其他二维材料堆叠构成范德瓦耳斯异质结的研究工作获得了大量成果^[5-10].

科学家们已成功制备了二维单层 TMDs 如 MoTe_2 和 MoSe_2 等^[11,12], 为进一步实验研究奠定

了基础. 具有代表性的 TMDs 材料 MoTe_2 , 通常有三种晶体结构^[13,14], 即 2H-MoTe_2 , $1\text{T}'\text{-MoTe}_2$, $\text{T}_d\text{-MoTe}_2$. 其中, 2H-MoTe_2 具有半导体属性, 属六方晶系, 空间群为 $P6_3/mmc$. 体材料 MoTe_2 为间接带隙半导体 (约 0.93 eV), 载流子迁移率可高达 $4000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ^[15]. 单层 MoTe_2 则为直接带隙 (约 1.1 eV), 在近红外区域表现出其特有的光学性质. Qiao 等^[16] 制备出薄层 MoTe_2 纳米片, 实验发现其析氢效率优于厚层 MoTe_2 材料. 有研究者还预测单层 MoTe_2 和单层 WTe_2 为二维拓扑绝缘体^[14,17], 由此更增加了科研工作者对 MoTe_2 和 WTe_2 等 TMDs 的研究兴趣. 此外, 磷烯是具有较

* 国家自然科学基金 (批准号: 11475212, 11505211, 61204008) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hyxingmail@126.com

‡ 通信作者. E-mail: zyguo@ihep.ac.cn

宽带隙和较高载流子迁移率的半导体材料^[18,19], 其中有两种同素异形体蓝磷和黑磷受到研究者的诸多关注. 二维层状蓝磷 (BlueP) 与黑磷不同, BlueP 是结构类似于 TMDs 六方晶体结构的间接带隙半导体 (≈ 2 eV), 而黑磷为正交结构的直接带隙半导体 (≈ 1.03 eV). 近期 Zhang 等^[20] 采用外延生长已成功制备了六方结构的单层 BlueP, 室温下 BlueP 具有高稳定性、快速的载流子迁移率等特性 ($\mu_e \sim 466$, $\mu_h \sim 1711$ cm²·V⁻¹·s⁻¹), 预示着蓝磷烯在电子和光电子领域的应用前景^[21,22].

关注二维层状材料的同时, 由单层或少层不同二维材料堆叠构成的范德瓦耳斯异质结也成为了研究热点. 因构成范德瓦耳斯异质结二维材料的带隙不同, 可通过合理设计将其进行合适的组合, 异质结两侧材料导带底和价带顶形成不连续的台阶, 从而可形成 type-I, type-II 或 type-III 能带排列. Zhang 等^[23] 成功制备 MoS₂/MoTe₂ type-II 异质结, 探测到 1550 nm 的红外光响应, Wu 等^[24] 制备的 MoTe₂/MoS₂ 异质结晶体管具有几毫安的开态电流, 开关比达 10⁵. 研究人员也对基于蓝磷烯的 BlueP/BP^[25], BlueP/TMDs^[26-28], BlueP/g-GaN^[29], BlueP/G^[30] 等范德瓦耳斯异质结的结构和电子特性展开理论研究. 这些研究成果表明二维层状材料形成异质结后不仅保持了其本征性质, 还表现出新的功能, 使其在电子、光电子器件的应用备受期待^[2,3,31,32], 可能实现下一代超薄器件^[33-35].

为了设计和制造相关器件, 深入了解异质结能带排列及界面特性至关重要. 为此, 需要深入探究构成异质结材料的电子、光学和输运等特性, 以及能带结构和能带排列的调控规律, 以便能够寻找到更多将新材料应用于实际器件中的方法. 传统半导体材料制备中广泛采用化学掺杂、表面改性和应力工程来实现能带结构调控, 其中应力工程被认为是较稳定、可控的调控方法. 对于二维材料, 通过改变材料层数、外加电场、材料应力等方式可实现其带隙的调控^[36-39]. 实验研究表明, 通过应力工程能有效调控二维材料的电子结构, 并提升异质结界面处电荷输运的性能^[40,41], 因此应力工程在二维材料及其异质结的研究和实际应用中会成为重要关注点之一. 由于晶胞内原子结构为六方晶系的 2H-*X*Te₂ (*X* = Mo, W) 与 BlueP 晶体结构相似, 晶格匹配度高. 本文以二维 2H-*X*Te₂ 与单层 BlueP 构建范德瓦耳斯异质结模型, 采用第一性原理探究

异质结层间相互作用引发的新的物理效应, 以及施加双轴应力对异质结能带结构、能带排列、电子及光学等相关性质的调控作用, 以期对二维异质结的合理设计、成功构建、有效调控和成功制备提供有益的参考.

2 计算方法

本文采用基于密度泛函理论 (DFT) 的 VASP (Vienna *ab initio* simulation package)^[42] 软件包进行第一性原理计算. 采用广义梯度近似的 Perdew-Burke-Ernzerhof^[43] 泛函描述电子交换和关联作用, 通过投影缀加波^[44] 方法描述离子实和价带子间相互作用, 采用 optB86 修正的 DFT 方法^[45] 以准确描述层状结构材料中范德瓦耳斯相互作用力. 布里渊区取样采用 Monkhorst-Pack^[44] 方法产生 $15 \times 15 \times 1$ *k* 点网格进行几何优化, 自洽场收敛标准为 10⁻⁶ eV, 截止能量为 500 eV, 能量收敛标准为 10⁻⁵ eV/atom, 以每个原子上力小于 0.01 eV/Å 来判定力的收敛. 取 *xy* 平面为二维材料平面方向, 设置大于 20 Å 的真空层作为隔离, 以进一步消除可能产生的相互作用.

为构建合理的 BlueP/*X*Te₂ (*X* = Mo, W) 范德瓦耳斯异质结模型, 首先计算了单层 BlueP 与 *X*Te₂ 的能带结构和晶格参数, 计算结果列于表 1 中. 结构优化后的 BlueP, MoTe₂, WTe₂ 的晶格参数分别为 3.28, 3.55, 3.55 Å. 图 1(a)–(c) 分别为单层 BlueP 和 *X*Te₂ 的能带结构图和分态密度图. 可以看出, 单层 BlueP 为 1.94 eV 的间接带隙, 导带最小值 (CBM) 位于 *G* 点与 *M* 点之间, 价带最大值 (VBM) 位于 *K* 点与 *G* 点之间; *X*Te₂ 为 CBM

表 1 单层 BlueP, MoTe₂ 和 WTe₂ 及异质结 BlueP/*X*Te₂ 的晶格常数、带隙、晶格失配度, 以及异质结 BlueP/*X*Te₂ 的层间距

Table 1. Lattice constants *a*, band gaps *E_g*, lattice mismatch σ of BlueP, MoTe₂ and WTe₂ monolayers and BlueP/*X*Te₂ heterostructures, and interlayer distance *d*₀ of BlueP/*X*Te₂ heterostructures.

	<i>a</i> /Å	<i>E_g</i> /eV	σ /%	<i>d</i> ₀ /Å
BlueP	3.28	1.94 (间)	—	—
MoTe ₂	3.55	1.11 (直)	—	—
WTe ₂	3.55	1.08 (直)	—	—
BlueP/MoTe ₂	3.39	0.6 (间)	3.6	3.3
BlueP/WTe ₂	3.43	0.713 (间)	3.9	3.4

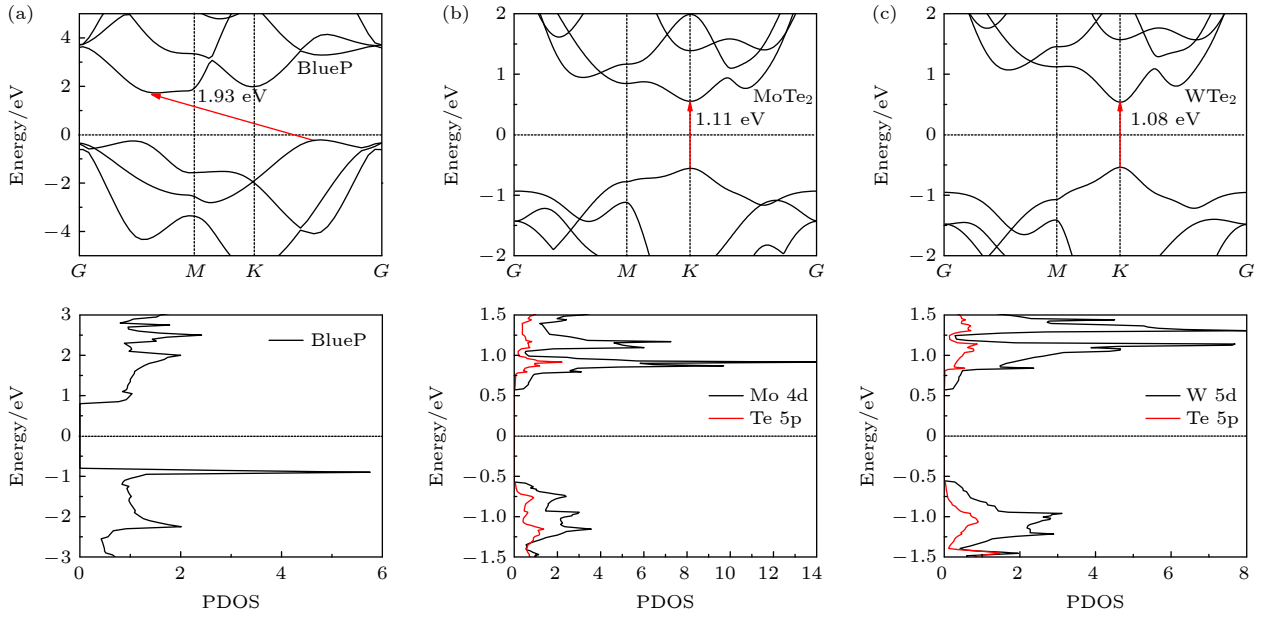

 图 1 单层 BlueP 与 $X\text{Te}_2$ 的能带结构图和态密度图 (a) BlueP; (b) MoTe_2 ; (c) WTe_2

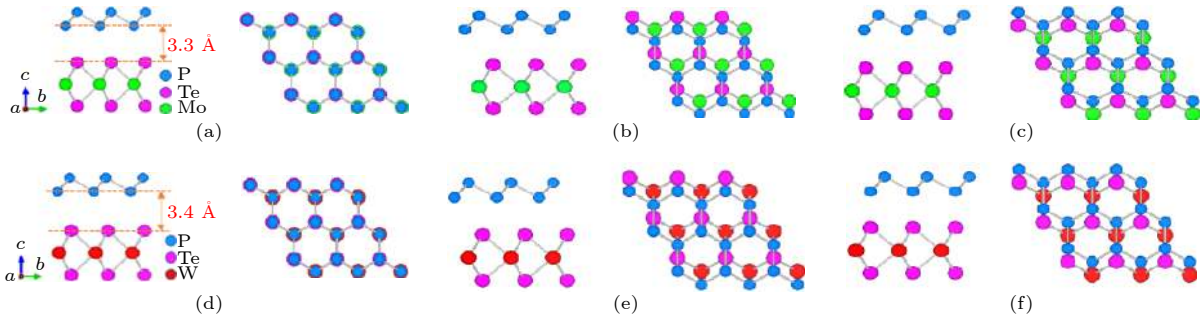
 Fig. 1. Energy band structures and density of states of BlueP and $X\text{Te}_2$ monolayer: (a) BlueP; (b) MoTe_2 ; (c) WTe_2 .

 图 2 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结模型的侧视图和俯视图 (a), (b), (c) BlueP/ MoTe_2 ; (d), (e), (f) BlueP/ WTe_2

 Fig. 2. Side and top view of BlueP/ $X\text{Te}_2$ van der Waals heterostructures: (a), (b), (c) BlueP/ MoTe_2 ; (d), (e), (f) BlueP/ WTe_2 .

与 VBM 均位于 K 点上的直接带隙, 禁带宽度分别为 1.11 eV (MoTe_2) 和 1.08 eV (WTe_2), 二者态密度的 VBM 分别由 Mo 原子和 W 原子的 d 轨道及部分 Te 原子 5p 轨道主导, CBM 则分别由 Mo 原子和 W 原子的 d 轨道主导. 上述计算结果与理论值^[21,46]和实验值^[47,48]相符, 也说明本文计算方法的准确性和可靠性. 如图 2 所示, 构建了六种高对称模型, 为能更好地实现晶格匹配, 建模选择在 $3 \times 3 \times 1$ 的 $X\text{Te}_2$ 上方堆叠 $3 \times 3 \times 1$ 的 BlueP, 来构建图 2(a) BlueP/ MoTe_2 与图 2(d) BlueP/ WTe_2 模型, 再将 BlueP 层沿 y 方向平移, 分别构建图 2(b)、图 2(e) 和图 2(c)、图 2(f) 模型. 结构优化后选取结构最稳定的堆垛方式图 2(a) 与图 2(d) 为研究用模型, 它们之间的晶格失配度 σ 分别为 3.6% (BlueP/ MoTe_2) 和 3.9% (BlueP/ WTe_2), 均

小于 5%^[42], 说明了实验形成 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结的可行性.

3 结果与讨论

3.1 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结结构稳定性

异质结界面间结合能 (E_b) 能够定量表征异质结的相对稳定性, 结合能绝对值越大, 说明体系越稳定. 本文计算结构弛豫后 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结界面结合能 E_b 随层间距 (d_0) 的变化关系, 以确定异质结最佳 d_0 . 异质结界面 E_b 由下式给出^[38,39,49]:

$$E_b = [E_{\text{BlueP}/X\text{Te}_2} - (E_{X\text{Te}_2} + E_{\text{BlueP}})] / N, \quad (1)$$

式中 $E_{\text{BlueP}/X\text{Te}_2}$, $E_{X\text{Te}_2}$, E_{BlueP} 分别为异质结 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 、单层 $X\text{Te}_2$ 和 BlueP 的总能; N 为 BlueP 单位晶胞数. 负值 E_b 表示形成了稳定的界面结合.

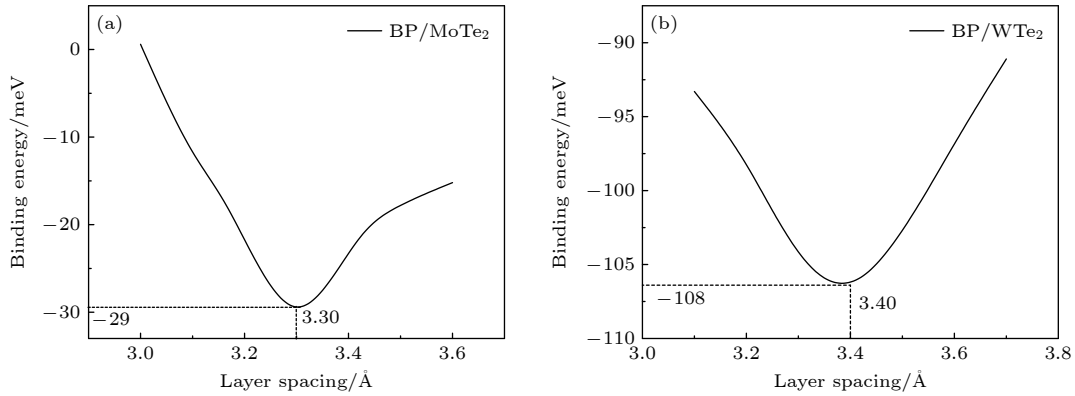

 图 3 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结结合能 E_b 随层间距 d_0 的变化 (a) BlueP/MoTe₂; (b) BlueP/WTe₂

Fig. 3. Binding energy of the BlueP/ $X\text{Te}_2$ van der Waals heterostructures as a function of the distance d_0 between the BlueP and $X\text{Te}_2$ monolayers: (a) BlueP/MoTe₂; (b) BlueP/WTe₂.

图 3 为 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结结合能随层间距的变化。计算结果表明, BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结层间距为 3.30 Å (BlueP/MoTe₂) 和 3.40 Å (BlueP/WTe₂) 时, 二者分别具有最低结合能 -29 meV/unit-cell (BlueP/MoTe₂) 和 -108 meV/unit-cell (BlueP/WTe₂), 均能形成最稳定的界面结合, 而 BlueP/WTe₂ 较 BlueP/MoTe₂ 能够形成更稳定的异质结。上述结果分别与异质结 [50–54] 体系结合能量级相同, 表明 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结层间形成了弱的范德瓦耳斯力, 具有能量稳定性且实验制备可行。本文后续的结果与讨论均基于上述层间距对应的稳定结构模型。

3.2 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结电子结构

图 4 为 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结的能带结构、总态密度、能带排列及 CBM 和 VBM 分解电荷密度图。由于蓝磷层为间接能带结构, 其对异质结的层间耦合作用使得 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 均为间接带隙半导体。如图 4(a) 和图 4(e) 能带结构图所示, 二者的 CBM 和 VBM 均分别位于 M 点和 G 点, 带隙宽度分别为 0.60 eV (BlueP/MoTe₂) 和 0.713 eV (BlueP/WTe₂)。这是由于形成异质结后, 提高了 G 点价带的能级, 降低了 M 点导带的能级, 且 BlueP 表现出比 MoTe₂ (WTe₂) 更低的导带能级, 使 BlueP 与 MoTe₂ (WTe₂) 的价带和导带间产生弱相互作用。因此, 二者能带结构的 CBM 主要表现为 BlueP 在 G 点与 M 点间的特征, 而 VBM 均表现出单层 MoTe₂ 和 WTe₂ 的特征。如图 4(b) 和图 4(f) 态密度图所示, 与单层 $X\text{Te}_2$ 态密度相比, 形成异质结后 $X\text{Te}_2$ 的态密度向低能态移动, 体系的 CBM 均

主要源于 BlueP 的贡献, 而 VBM 分别主要源于 MoTe₂ 和 WTe₂。综上所述, 在 BlueP/MoTe₂ 和 BlueP/WTe₂ 体系均形成了间接带隙的 type-II 能带排列, 其 CBM 均位于 M 点的 BlueP, VBM 位于 G 点的 $X\text{Te}_2$ 中, 仅 BlueP/MoTe₂ 的带隙值略小于 BlueP/WTe₂, 能带排列如图 4(c) 和图 4(g) 所示。图 4(d) 和图 4(h) 给出了 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 的 CBM 和 VBM 的分解电荷密度图, 图示结果更直观地说明 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结是 CBM 源于 BlueP, 而 VBM 源于 $X\text{Te}_2$ 的 type-II 能带排列。由于 BlueP 与 $X\text{Te}_2$ 价带和导带的相对独立, 及其层间强耦合作用缩短了异质结区的能量差, 使异质结比单层材料具有更长的波长响应能力。若异质结处于光激发状态, 光生电子通过 $X\text{Te}_2$ 价带到 BlueP 导带的直接跃迁, 缩短了带间跃迁的能量差 (带间能量差分别为 BlueP/MoTe₂ ~ 0.60 eV, BlueP/WTe₂ ~ 0.713 eV)。相较于单层 BlueP 与 $X\text{Te}_2$, 异质结拓宽了光谱响应范围。同时, 由于 BlueP 与 $X\text{Te}_2$ 费米能级的差异, 在异质结界面处产生接触电势差, 驱动电荷转移并形成空间电荷区, 产生内建电场, 使得光生电子和空穴分别快速转移至 BlueP 层的 CBM 和 $X\text{Te}_2$ 层 VBM, 从而自发地在空间上实现光生电子和空穴的分离与收集, 极大地促进光生载流子的生成, 进而能够提升异质结的光电特性, 因此二者作为设计和制造新型光电器件的新型材料具有令人期待的应用前景。

3.3 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结应力调控研究

对 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结沿 a 和 b 轴方向施加双轴应力, 施加的应力与应变间存在对应关系为

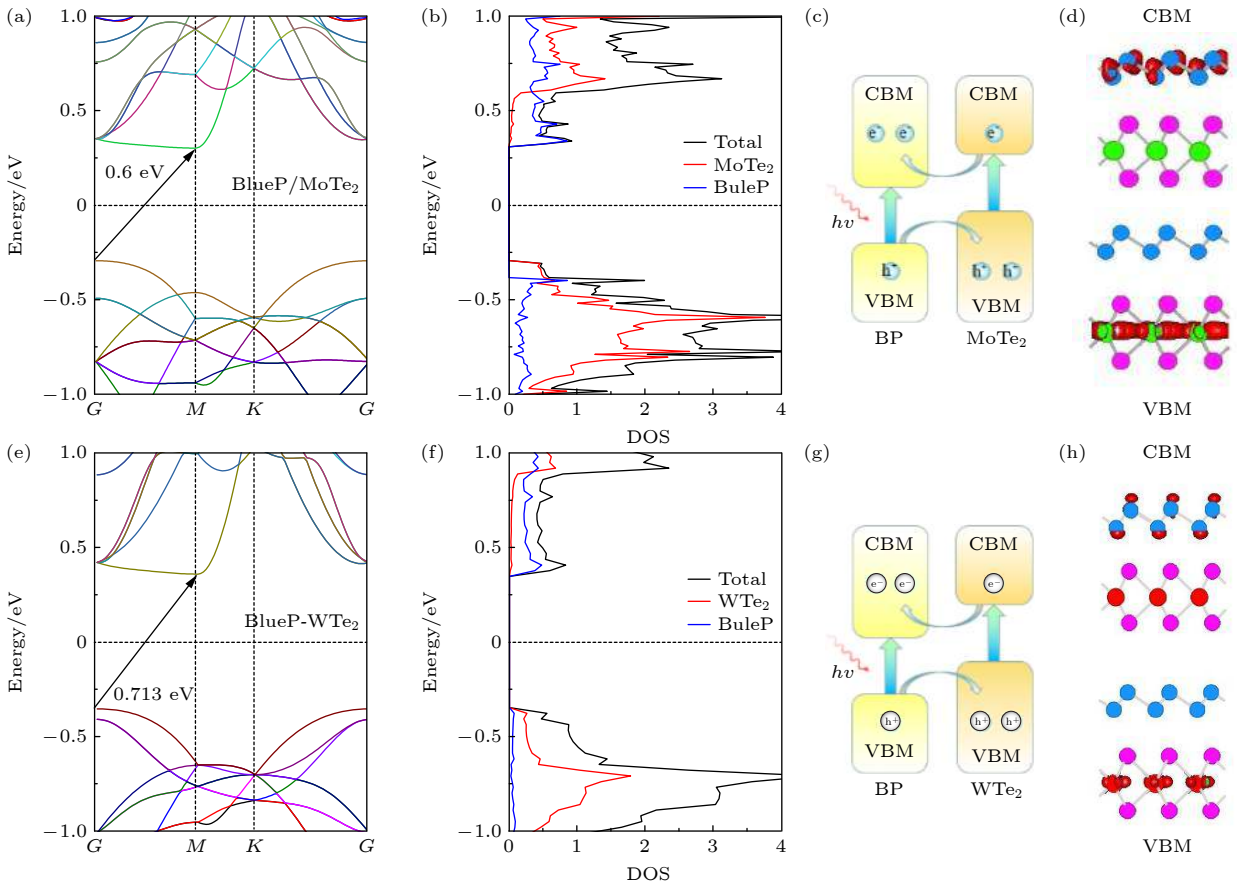


图 4 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结能带结构、分态密度、能带排列及异质结中 CBM 和 VBM 分解电荷密度图 (a)—(d) BlueP/ MoTe_2 ; (e)—(h) BlueP/ WTe_2

Fig. 4. Energy band structures, partial density of states (PDOS), band alignment and the band decomposed charge density of CBM and VBM in heterostructures: (a)–(d) BlueP/ MoTe_2 ; (e)–(h) BlueP/ WTe_2 .

$\varepsilon = (a - a_0)/a_0 \times 100\%$, 式中 a_0 为结构优化后体系未施加应力时晶格常数, $\varepsilon > 0$ ($\varepsilon < 0$) 表示体系施加拉伸 (压缩) 应力. 图 5 为 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结体系总能与双轴应变关系图, $\Delta E = E_\varepsilon - E_0$ [55], 式中 E_0 与 E_ε 分别为施加应力前后体系的总能. 若 $\Delta E > 0$, 则表明异质结施加应力后体系仍处于稳定状态. 如图 5 所示, 应力在从 -8% 到 $+8\%$ 的压缩和拉伸变化区间内 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 体系的 $\Delta E > 0$, 且随着应力的增加 ΔE 值逐渐增大, 并未出现能量突变点, 说明 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 体系施加应力后晶格有序性未受到破坏, 体系仍处于稳定状态.

图 6 为不同应力下 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结能带结构图. 如图 6(a) 所示, 当施加压缩应力 $-2\% < \varepsilon < -4\%$ 时, BlueP/ MoTe_2 的 VBM 位置的动量空间产生移动, 由未施加应力时的 G 点移至 M 点, 此时体系 CBM 和 VBM 位置均位于动量空间 M 点, 实现动量匹配, 使间接带隙转变为直接带隙, 且随着应力的增加带隙由 0.43 eV 减小至 0.207 eV ; 压

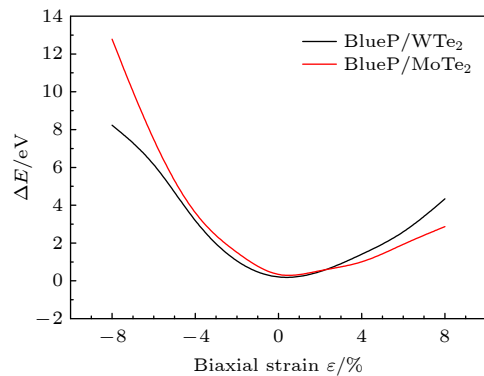


图 5 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结体系总能与双轴应变关系图
Fig. 5. Total energy of the BlueP/ $X\text{Te}_2$ van der Waals heterostructures as a function of the biaxial strain ε .

缩应力增加至 -6% 和 -8% 时, 体系费米能级 (E_F) 穿过价带和导带, 带隙减小为零, 异质结转变为金属性. 施加拉伸应力 $+2\% < \varepsilon < +6\%$ 时, BlueP/ MoTe_2 保持间接带隙结构, 随着应力的增加 VBM 向 E_F 移动, 带隙由 0.52 eV 逐渐减小至 0.35 eV . 拉伸应力增至 $+8\%$, 体系动量空间产生移动, VBM

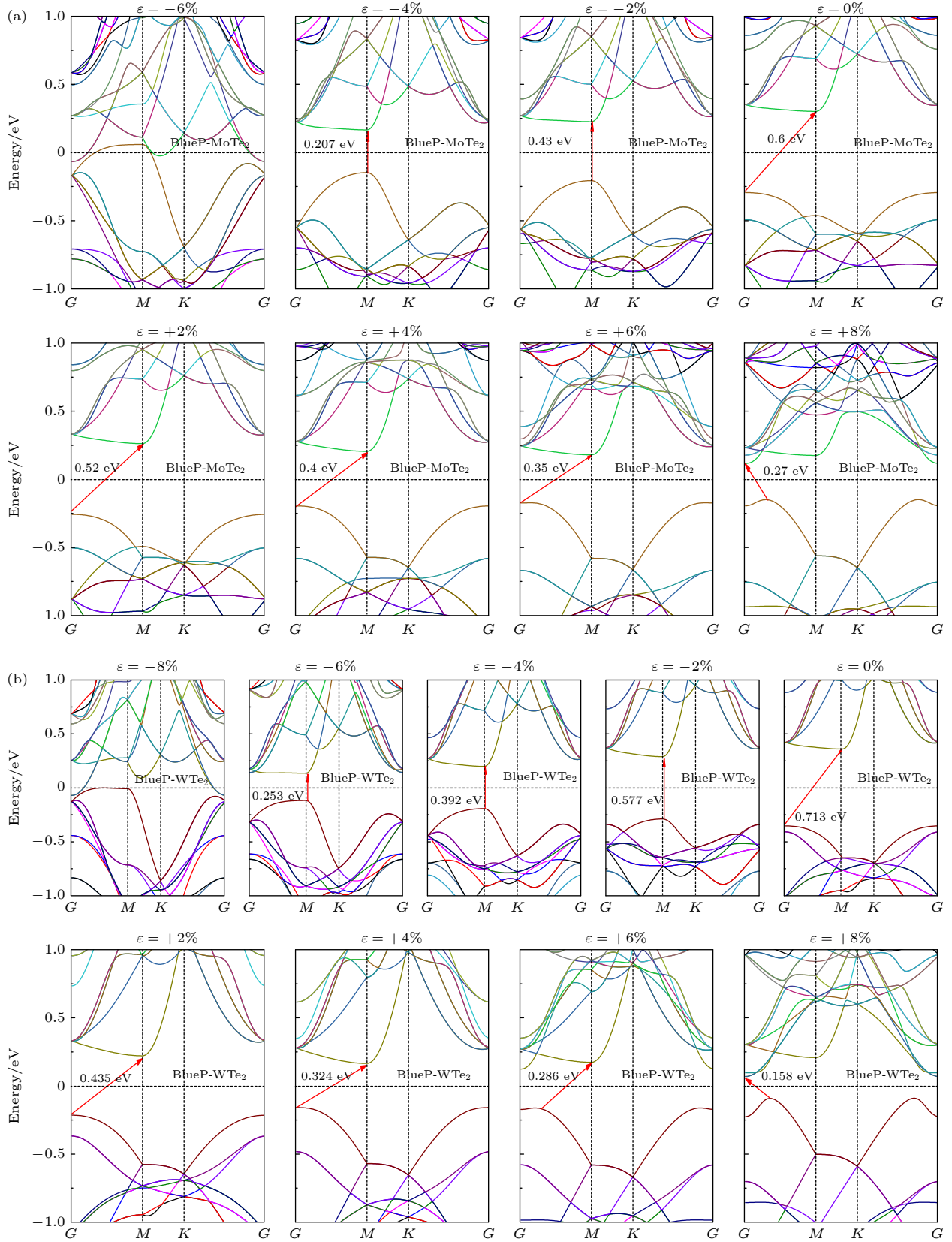


图 6 施加不同应力下 (a) BlueP/MoTe₂ 和 (b) BlueP/WTe₂ 异质结能带图, 其中 $\epsilon > 0$ ($\epsilon < 0$) 表示体系施加拉伸 (压缩) 应力
 Fig. 6. Energy band structures under different biaxial strains for (a) BlueP/MoTe₂ and (b) BlueP/WTe₂, where $\epsilon > 0$ ($\epsilon < 0$) represents the tensile strain (compressive strain).

由 G 点移至 G 和 M 点之间, CBM 则由 M 点移至 G 点, 带隙减小至 0.27 eV. 与 BlueP/MoTe₂ 体系相似, 如图 6(b) 所示施加压缩应力 $-2\% < \varepsilon < -6\%$, BlueP/WTe₂ 的 VBM 由间接带隙时 G 点移至 M 点, 体系转变为直接带隙, 且随着应力的增加带隙由 0.577 eV 逐渐减小至 0.286 eV; 与 BlueP/MoTe₂ 异质结不同, 当压缩应力增加至 -8% 时, BlueP/WTe₂ 的 E_F 穿过导带, 带隙减小为零, 异质结转变为金属性. 施加拉伸应力 $+2\% < \varepsilon < +8\%$, BlueP/WTe₂ 亦保持间接带隙结构, 随着应力的增加 VBM 向 E_F 移动, 带隙由 0.435 eV 逐渐减小至 0.158 eV. 在上述变化的同时, 当应力增加至 $+6\%$ 和 $+8\%$ 时, 动量空间产生移动, 体系的 VBM 由 G 点移至 G 与 M 点之间后, CBM 又由 M 点移至 G 点.

图 7 为不同应力下 BlueP/ X Te₂ 异质结分态密度图. 如图 7(a) 所示, 在应力从 -6% 到 $+8\%$ 的压缩和拉伸变化区间内, 随着应力的增加 BlueP/MoTe₂ 体系价带和导带逐渐延展, 且电子态密度均向低能态移动. 不同之处在于, 随着压缩应力的增加 Mo 的 d 态较 Te 和 P 的 p 态移动速度更快, 导致能带结构带隙逐渐减小直至转变为金属; 而随着拉伸应力的增加, BlueP 的导带和价带向 E_F 移动, 导致异质结带隙逐渐减小. BlueP/MoTe₂ 施加压缩应力为 $-2\% < \varepsilon < -4\%$ 时, 体系态密度仍表现为 CBM 主要源于 BlueP, VBM 源于 MoTe₂ 贡献的 type-II 能带排列. 但施加应力使动量空间发生移动, 异质结由间接带隙 type-II 转变为直接带隙的 type-II 能带排列. BlueP/MoTe₂ 施加拉伸应力为 $+2\% < \varepsilon < +8\%$ 时, 体系态密度 CBM 和

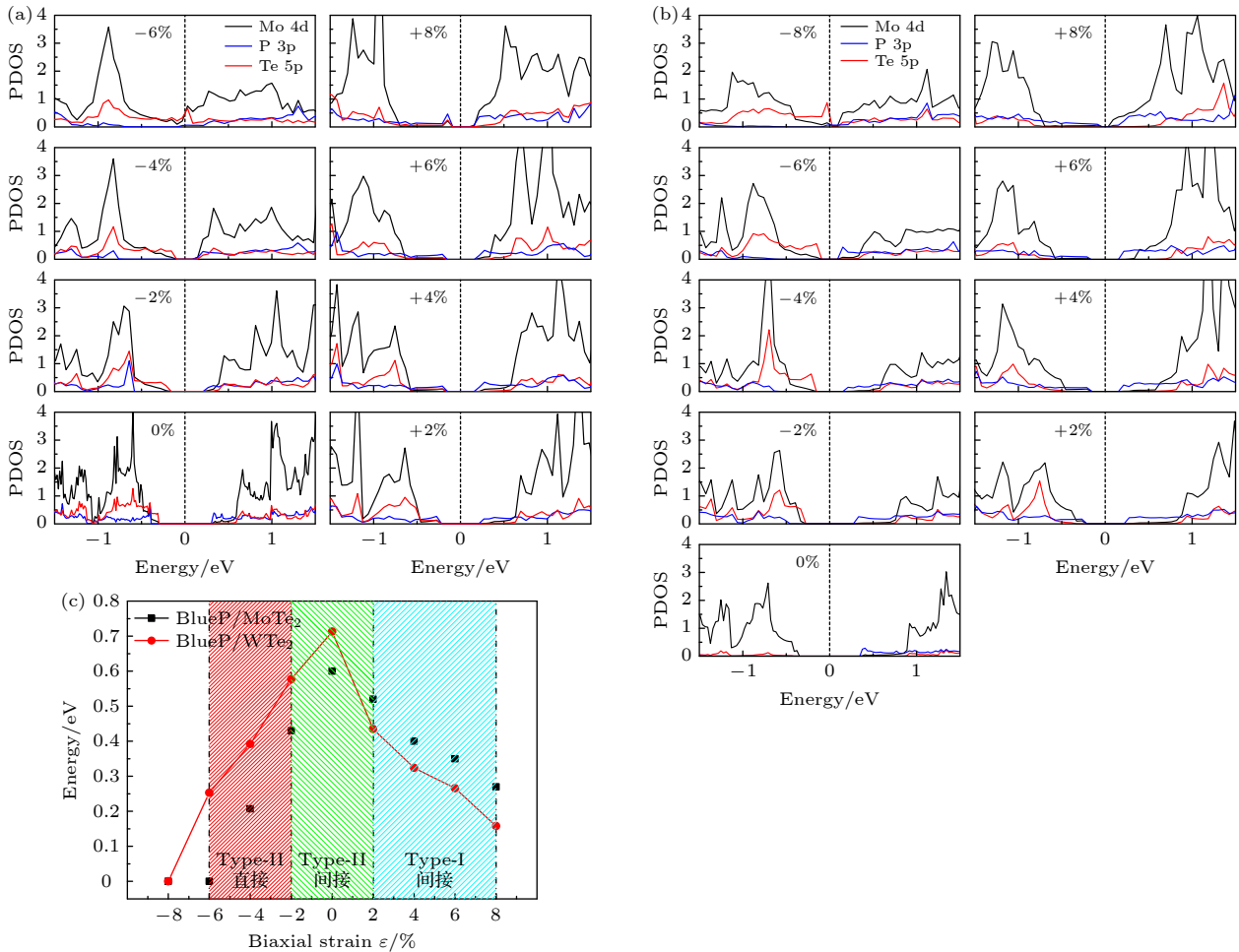


图 7 施加不同应力下 (a) BlueP/MoTe₂ 和 (b) BlueP/WTe₂ 异质结分态密度图; (c) BlueP/ X Te₂ 带隙与应力变化关系图; $\varepsilon > 0$ ($\varepsilon < 0$) 表示体系施加拉伸(压缩)应力

Fig. 7. Partial density of states under different biaxial strains for (a) BlueP/MoTe₂ and (b) BlueP/WTe₂; (c) the band gap as a function of biaxial strains in BlueP/ X Te₂ van der Waals heterostructures; $\varepsilon > 0$ ($\varepsilon < 0$) represents the tensile strain (compressive strain).

VBM 均主要源于 BlueP, 异质结由 type-II 转变为 type-I 型能带排列. 结合前述能带结构分析, 体系施加拉伸应力没有实现动量空间匹配, 异质结转变为间接带隙的 type-I 能带排列. 如图 7(b) 所示, 在应力从 -8% 到 +8% 的变化区间内, 随应力的增加 BlueP/WTe₂ 价带和导带表现出的延展性、电子态密度均向低能态移动、带隙的减小, 以及施加压缩和拉伸应力时异质结能带排列的演化等特征均与 BlueP/MoTe₂ 异质结的变化过程相似, 仅当压缩应力增至 -8% 时, 带隙减小为零转变为金属.

图 7(c) 更直观说明了施加应力对 BlueP/XTe₂ 异质结能带结构调控的演变过程. BlueP 与 XTe₂ 构成的异质结同为间接带隙 type-II 能带排列, 施加应力改变了 BlueP/XTe₂ 异质结带隙宽度和能带排列类型. 可以看出, 施加压缩应力使动量空间移动, BlueP/XTe₂ 由间接带隙 type-II 转变为直接带隙 type-II 能带排列; 施加拉伸应力 BlueP/XTe₂ 由间接带隙 type-II 转变为间接带隙 type-I 能带排列. 此外, 两异质结带隙宽度均随应力增大而减小, 当施加压缩应力时, 二者带隙宽度的变化率相同, 但由于二者晶格失配度有差异, BlueP/MoTe₂ 在 -6% 时带隙变为零, 而 BlueP/WTe₂ 在压缩应力增至 -8% 时带隙才变为零; 当施加拉伸应力时, BlueP/WTe₂ 带隙减小的速率较 BlueP/MoTe₂ 快. 综合比较压力调控的变化可知, BlueP/MoTe₂ 对压缩应力调控更敏感, 而 BlueP/WTe₂ 对拉伸应力调控更敏感. 综上所述, 压缩应力调控将异质结转变为直接带隙 type-II 能带排列, 改变了原间接带隙光吸收弱的情况, 大幅提升了异质结光电性能; 拉伸应力调控将异质结转变为间接带隙 type-I 能带排列, I 型异质结可实现电子和空穴在空间上被束缚在同一种半导体材料中, 有利于电子和空穴的收集和应用, 从而更高效地实现辐射复合. 应力调控能带排列类型同时使异质结带隙宽度减小, 将异质结光谱响应范围由单层材料的近红外光谱拓宽至中红外光谱区 (如图 6 和图 7 所示), 使其在窄禁带中远红外半导体材料及光电器件具有令人期待的应用价值.

3.4 BlueP/XTe₂ 异质结光学性质研究

介电函数 $\varepsilon(\omega)$ 材料的电子结构密切相关, 其表达式 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ 宏观光学性质与微观电子结构联系起来, 反映了固体能带结构及各种

光谱的信息^[56]. 由介电函数的实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 推知入射光在固体材料中的传播特性. $\varepsilon_1(0)$ 静态介电常数, 其决定了材料的屏蔽特性, $\varepsilon_1(0)$ 值越大说明材料的屏蔽特性越强; 若在某一入射光频率范围内 $\varepsilon_1(\omega) < 0$, 则说明该频率的入射光在此材料中无法传播. 图 8 为不同应力下 BlueP/XTe₂ 异质结介电函数实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 的谱图. 如图 8(a) 和图 8(b) 所示, 单层 BlueP 和 XTe₂ 的 $\varepsilon_1(0)$ 分别为 2.19 (BlueP), 5.43 (MoTe₂), 5.24 (WTe₂). 形成异质结后, 该值分别增加为 6.93 (BlueP/MoTe₂) 和 6.53 (BlueP/WTe₂), 前者略高于后者, 均表现出很好的屏蔽特性. 如图 8(c)、图 8(d) 和图 8(e)、图 8(f) 所示, 施加压缩应力异质结 BlueP/XTe₂ 的静态介电常数 $\varepsilon_1(0)$ 随着应力的增大而大幅增加 (如图 8(c) 中插图所示), 说明施加压缩应力使材料的屏蔽特性增强; 施加拉伸应力时异质结的 $\varepsilon_1(0)$ 随应力增加略有减小. 对于直接带隙半导体材料, 静态介电常数与带隙间存在如下关系^[57]:

$$\varepsilon_1(0) \approx 1 + \left(\frac{\hbar\omega_p}{E_g}\right)^2, \quad (2)$$

式中, $\hbar\omega_p$ 为等离子体能量, E_g 为带隙. 因此, 由图 8(c) 中插图所示 $\varepsilon_1(0)$ 随压缩应力增加而增大的变化趋势可推断异质结 BlueP/XTe₂ 的带隙是随应力增加而减小的, 这与图 6 中带隙随压缩应力增加而减小的结果一致. 对于间接带隙半导体, 电子跃迁发生在不同的动量空间, 其光学性质与体系电子结构的关系较复杂, 故不适用上述关系式. 此外, 单层 BlueP 和 WTe₂ 的介电函数实部分别在 7.34—10.56 eV 和 7.34—15 eV 光能区间 $\varepsilon_1(\omega) < 0$, 而单层 MoTe₂ 则在 4.6—15 eV 的光能区间有多个频段 $\varepsilon_1(\omega) < 0$, 形成异质结后的介电函数实部在 7.0—15 eV 光能区间附近时 $\varepsilon_1(\omega) < 0$, 说明上述能量区间的光不能在这些材料中传播.

图 9 为不同应力下 BlueP/XTe₂ 异质结的光吸收谱. 如图 9(a) 和图 9(b) 所示, 单层 BlueP 对可见光吸收弱, 在紫外光区吸收较强; 单层 MoTe₂ 与 WTe₂ 在红外光均有较强的吸收边 (~1 eV), 且在红外到紫外光区间吸收系数均大于单层 BlueP, 这源于二者均为直接带隙, 计算结果与文献 [26] 相符; 形成异质结后, BlueP/XTe₂ 的光吸收谱均发生红移, 且有较强的光吸收, 光吸收系数达 10^{-5} cm^{-1} , 两异质结分别在大约 0.6—0.7 eV 附近有吸收边. 单层材料和异质结的光吸收特性与

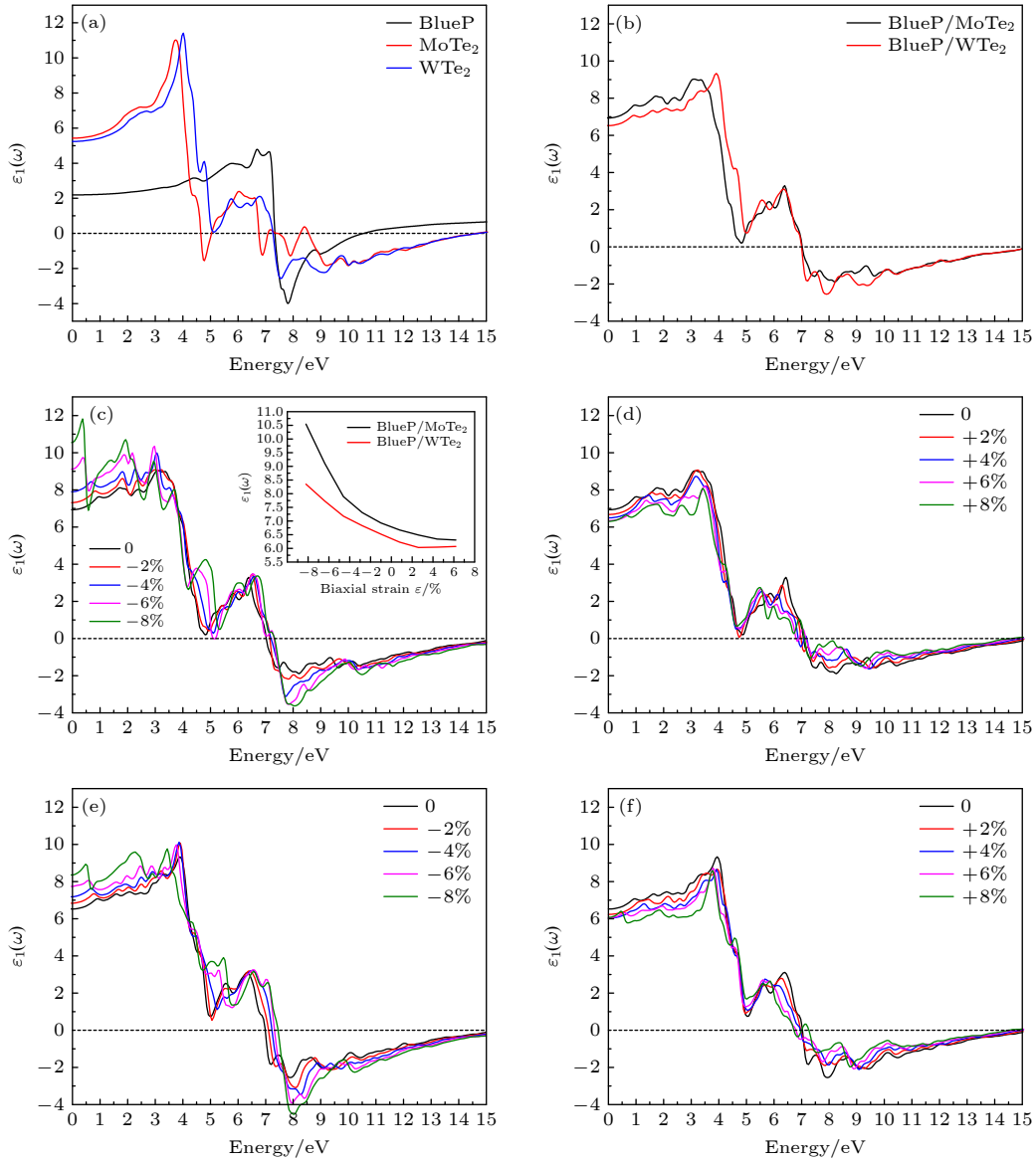


图 8 单层 BlueP 与 $X\text{Te}_2$ 及施加不同应力下 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结介电函数实部 $\epsilon_1(\omega)$ 谱图 (a) 单层 BlueP 与 $X\text{Te}_2$; (b) BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结; (c), (e) BlueP/MoTe₂, BlueP/WTe₂, $\epsilon < 0$; (d), (f) BlueP/MoTe₂, BlueP/WTe₂, $\epsilon > 0$; $\epsilon > 0$ ($\epsilon < 0$) 表示体系施加拉伸 (压缩) 应力

Fig. 8. Real part of the dielectric function of BlueP and $X\text{Te}_2$ monolayer, and BlueP/ $X\text{Te}_2$ heterostructures under different biaxial strains: (a) BlueP and $X\text{Te}_2$ monolayer; (b) BlueP/ $X\text{Te}_2$; (c), (e) BlueP/MoTe₂, BlueP/WTe₂, $\epsilon < 0$; (d), (f) BlueP/MoTe₂, BlueP/WTe₂, $\epsilon > 0$; $\epsilon > 0$ ($\epsilon < 0$) represents the tensile strain (compressive strain).

图 6 中能带结构的计算结果相符. 如图 9(a) 插图所示, 从吸收边至紫外光的 4.5 eV 区间异质结 BlueP/MoTe₂ 比 BlueP/WTe₂ 有更强的光吸收, 在光子能量大于 4.5 eV 后 BlueP/WTe₂ 的光吸收系数较大. 图 9(c) 和图 9(d) 分别为 BlueP/ $X\text{Te}_2$ 在施加应力下的光吸收谱. 如图 9(c) 所示, 与未施加应力相比, 随压缩应力增加, BlueP/MoTe₂ 吸收边发生红移, 光吸收响应拓展至中红外光谱区且吸收系数增加; 随着拉伸应力增加, BlueP/MoTe₂ 的光吸收系数较未施加应力时在吸收边至 1.25 eV

区间降低, 在 1.25—1.8 eV 的光能区间略有增加, 在 1.8—2.0 eV 光能区间开始减小. 如图 9(d) 所示, 异质结 BlueP/WTe₂ 光吸收谱特性随施加应力的变化过程与 BlueP/MoTe₂ 类似, 仅在施加压缩应力时, BlueP/MoTe₂ 在中红外至红外光区间的光吸收系数较 BlueP/WTe₂ 大. 如图 9(c)—(d) 插图所示, 施加压缩和拉伸应力, 两异质结光吸收谱中位于 4.5 eV 和 7.5 eV 附近的吸收峰均发生红移. 较未施加应力时, 施加压缩应力且随着应力增加, 两异质结的光吸收谱发生红移, 光吸收系数增

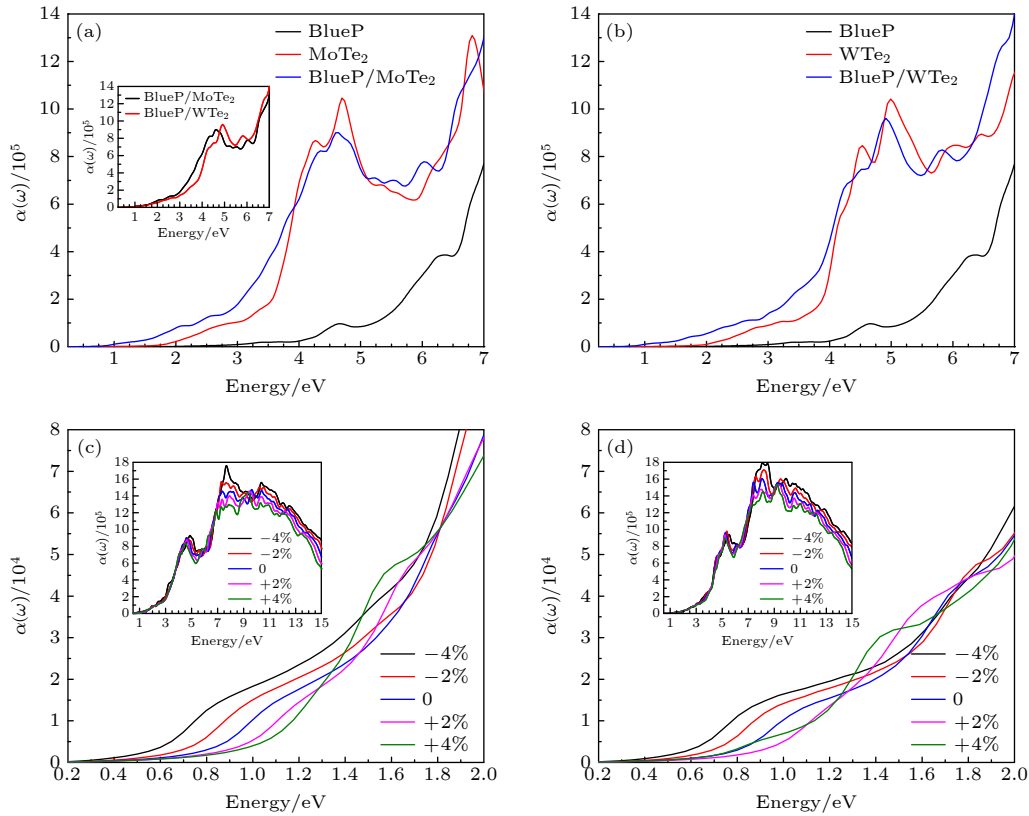


图9 单层BlueP与 $X\text{Te}_2$ 及施加不同应力下BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结光吸收谱 (a)单层BlueP, MoTe_2 与BlueP/ MoTe_2 ; (b)单层BlueP, WTe_2 与BlueP/ WTe_2 ; (c), (d) BlueP/ MoTe_2 , BlueP/ WTe_2 , 施加应力区间为-4%+4%

Fig. 9. Absorption coefficient of BlueP and $X\text{Te}_2$ monolayer, and BlueP/ $X\text{Te}_2$ heterostructures under different biaxial strains: (a) BlueP, MoTe_2 monolayer and BlueP/ MoTe_2 ; (b) BlueP, WTe_2 monolayer and BlueP/ WTe_2 ; (c) and (d) for BlueP/ MoTe_2 and BlueP/ WTe_2 within the biaxial strains -4% +4%, respectively.

大. 这主要源于施加压缩应力使异质结能带结构由间接带隙转变为直接带隙, 因此光吸收增强; 另随应力增加带隙减小, 因此表现出光吸收红移.

4 结论

采用第一性原理计算探讨了蓝磷烯与过渡金属硫化物 $\text{MoTe}_2/\text{WTe}_2$ 形成范德瓦耳斯异质结的电子结构和光学性质. 计算结果表明, 单层BlueP与 $X\text{Te}_2$ 均形成间接带隙的type-II能带排列. 在光激发下异质结自发地在空间上实现光生电子和空穴的分离与收集, 提升了异质结的光电特性. 光吸收谱的分析表明, 较单层材料异质结, 吸收谱发生红移且有较强的光吸收, 同时屏蔽特性也增强. BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结的能带结构、能带排列类型及光学性质表现出显著地应力可调控性. 施加压缩应力, BlueP/ $X\text{Te}_2$ 转变为直接带隙type-II能带排列, 随应力继续增加其转变为金属性; 施加拉伸应力, 异质结转变为间接带隙type-I能带排列. BlueP/ $X\text{Te}_2$ 的光学性质, 随压缩应力增加吸收边

发生红移, 光吸收响应拓展至中红外光谱区且吸收系数增大, 其中BlueP/ MoTe_2 较BlueP/ WTe_2 在中红外至红外光区间表现出更强的光吸收响应. 同时, 随压缩应力增大BlueP/ $X\text{Te}_2$ 的静态介电常数 $\epsilon_1(0)$ 大幅增加, 屏蔽特性增强. 综上所述, 蓝磷烯与 $\text{MoTe}_2/\text{WTe}_2$ 形成稳定的范德瓦耳斯异质结, 压缩应力对BlueP/ MoTe_2 和BlueP/ WTe_2 均有显著的调控作用, 而BlueP/ MoTe_2 对调控更敏感. 外加应力的调控作用影响了BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结的能带结构, 从而影响其光学性质, 反之, 外加应力使异质结的光学性质发生变化, 反映了其能带结构、能带排列、界面耦合作用的变化, 能够帮助我们深入认识和理解二维层状材料构成的范德瓦耳斯异质结的相关变化规律, 并探讨其更多新的应用. BlueP/ $X\text{Te}_2$ 异质结在应力调控下所表现出的能带排列演化及光谱响应范围的拓宽等特性, 使其在窄禁带中红外半导体材料及光电器件具有潜在的应用价值.

参考文献

- [1] Gupta A, Sakthivel T, Seal S 2015 *Prog. Mater. Sci.* **73** 44
- [2] Shi J, Tong R, Zhou X, Gong Y, Zhang Z, Ji Q, Zhang Y, Fang Q, Gu L, Wang X 2016 *Adv. Mater.* **28** 10664
- [3] Li B, Xing T, Zhong M, Huang L, Lei N, Zhang J, Li J, Wei Z 2017 *Nat. Commun.* **8** 1958
- [4] Chen S Y, Goldstein T, Venkataraman D, Ramasubramanian A, Yan J 2016 *Nano. Lett.* **16** 5852
- [5] Kang J, Tongay S, Zhou J, Li J, Wu J 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 012111
- [6] Tongay S, Fan W, Kang J, Park J, Koldemir U, Suh J, Narang D, Liu K, Ji J, Li J 2014 *Nano. Lett.* **14** 3185
- [7] Yu Y F, Hu S, Su L Q, Huang L J, Liu Y, Jin Z H, Purezky A A, Gehegan D B, Kim K W, Zhang Y, Cao L Y 2015 *Nano Lett.* **15** 486
- [8] Nguyen C V 2018 *Superlattices Microst.* **116** 79
- [9] Yu L, Lee Y H, Ling X, Santos E J G, Shin Y C, Lin Y, Dubey M, Kaxiras E, Kong J, Wang H 2014 *Nano. Lett.* **14** 3055
- [10] Sata Y, Moriya R, Morikawa S, Yabuki N, Masubuchi S, Machida T 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 023109
- [11] Ji Q, Zhang Y, Zhang Y, Liu Z 2015 *Chem. Soc. Rev.* **44** 2587
- [12] Roy A, Movva H C P, Satpati B, Kim K, Dey R, Rai A, Pramanik T, Guchhait S, Tutuc E, Banerjee S K 2016 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 7396
- [13] Zandt T, Dwelk H, Janowitz C, Manzke R 2007 *J. Alloys Compd.* **442** 216
- [14] Qian X F, Liu J W, Fu L, Li J 2014 *Science* **346** 1344
- [15] Seok J, Lee J H, Cho S, Ji B, Kim H W, Kwon M, Kim D, Kim Y M, Oh S H, Kim S W 2017 *2D Mater.* **4** 025061
- [16] Qiao H, Huang Z Y, Liu S Y, Liu Y D, Li J 2018 *Ceram. Int.* **44** 21205
- [17] Muechler L, Alexandradinata A, Neupert T, Car R 2016 *Phys. Rev. X* **6** 041069
- [18] Qiao J, Kong X, Hu Z X, Yang F, Ji W 2014 *Nat. Commun.* **5** 4475
- [19] Li L, Yu Y, Ye G J, Ge Q, Ou X, Wu H, Feng D, Chen X H, Zhang Y 2014 *Nat. Nanotechnol.* **9** 372
- [20] Zhang J L, Zhao S, Han C, Wang Z, Zhong S, Sun S, Guo R, Zhou X, Gu C, Yuan K 2016 *Nano Lett.* **16** 4903
- [21] Zhu Z, Tomanek D 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 176802
- [22] Xiao J, Long M, Zhang X, Ouyang J, Xu H, Gao Y 2015 *Sci. Rep.* **5** 09961
- [23] Zhang K, Zhang T, Cheng G, Li T, Wang S, Wei W, Zhou X, Yu W, Sun Y, Wang P 2016 *ACS Nano.* **10** 3852
- [24] Wu E, Xie Y, Liu Q, Hu X, Liu J, Zhang D, Zhou C 2019 *ACS Nano.* **13** 5430
- [25] Le H, Li J 2016 *Appl. Phys. Lett.* **108** 083101
- [26] Li H, Li D, Luo H 2020 *Phys. Status Solidi* **257** 2000006
- [27] Li H, Cui Y, Li W, Ye L, Mu L 2020 *Appl. Phys. A* **126** 92
- [28] You B, Wang X, Zheng Z, Mi W 2016 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** 7381
- [29] Sun M, Chou J P, Yu J, Tang W 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 17324
- [30] Zhu J, Zhang J, Hao Y 2016 *Jpn. J Appl. Phys.* **55** 080306
- [31] Bernardi M, Palumbo M, Grossman J C 2013 *Nano. Lett.* **13** 3664
- [32] Lopez-Sanchez O, Lembke D, Kayci M, Radenovic A, Kis A 2013 *Nat. Nanotechnol.* **8** 497
- [33] Mak K F, Shan J 2016 *Nature Photon.* **10** 216
- [34] Liu G, Xiao D, Yao Y, Xu X, Yao W 2015 *Chem. Soc. Rev.* **46** 2643
- [35] Duan X, Wang C, Pan A, Yu R, Duan X 2016 *CHemInform* **47** 8859
- [36] Kumar A, Ahluwalia P K 2012 *Eur. Phys. J. B* **85** 186
- [37] Terrones H, López-Urías F, Terrones M 2013 *Sci. Rep.* **3** 1549
- [38] Guo L J, Hu J S, Ma X G, Xiang J 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 097101 (in Chinese) [郭丽娟, 胡吉松, 马新国, 项炬 2019 物理学报 **68** 097101]
- [39] Ma H H, Zhang X B, Wei X Y, Cao J M 2020 *Acta Phys. Sin. v.* **69** 117101 (in Chinese) [马浩浩, 张显斌, 魏旭艳, 曹佳萌 2020 物理学报 **69** 117101]
- [40] Manzeli S, Ovchinnikov D, Pasquier D, Yazyev O V, Kis A 2017 *Nat. Rev. Mater* **2** 17033
- [41] Liu B, Liao Q, Zhang X, Du J, Zhang Y 2019 *ACS Nano.* **13** 9057
- [42] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comp. mat. er* **6** 15
- [43] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M, Erratum 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [44] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [45] Klime Jí, Bowler D R, Michaelides A 2010 *J. Phys. Condens. Matter* **22** 022201
- [46] Ghosh B, Nahas S, Bhowmick S, Agarwal A 2015 *Phys. Rev. B* **91** 115433
- [47] Yang J, Lü T, Myint Y W, Pei J, Lu Y 2015 *ACS Nano* **9** 6603
- [48] Ding Y, Wang Y, Ni J, Shi L, Shi S, Tang W 2011 *Physica B* **406** 2254
- [49] Pham K D, Phuc H V, Hieu N N, Hoi B D, Nguyen C V 2018 *AIP Adv.* **29** 075207
- [50] Chen D, Lei X, Wang Y, Zhong S, Liu G, Xu B, Ouyang C 2019 *Appl. Surf. Sci.* **497** 143809
- [51] Zhang W, Zhang L 2017 *Rsc Advances* **7** 34584
- [52] Sun M, Chou J P, Yu J, Tang W 2018 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** 24726
- [53] Zhang W X, He W H, Zhao J W, He C 2018 *J. Solid. State. Chem.* **265** 257
- [54] Zhang Z H, Xie Z F, Liu J 2020 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22** 5873
- [55] He W H 2019 *M. S. Dissertation* (Xi'an: Chang'an University) (in Chinese) [何文浩 2019 硕士学位论文 (西安: 长安大学)]
- [56] Shen X C 2002 *Spectra and Optical Properties of Semiconductors* (Beijing Science Press) p76 (in Chinese) [沈学础 2002 半导体光谱和光学性质 (北京科学出版社) 第76页]
- [57] Penn D R 1962 *Phys. Rev.* **128** 2093

Tunable electronic structure and optical properties of BlueP/ $X\text{Te}_2$ ($X = \text{Mo}, \text{W}$) van der Waals heterostructures by strain^{*}

Xing Hai-Ying^{1)3)†} Zheng Zhi-Jian¹⁾ Zhang Zi-Han¹⁾

Wu Wen-Jing¹⁾ Guo Zhi-Ying^{2)‡}

1) (*School of Electronics and Information Engineering, Tiangong University, Tianjin 300387, China*)

2) (*Beijing Synchrotron Radiation Facility, Institute of High Energy Physics, China Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

3) (*Engineering Research Center of High Power Solid State Lighting Application System, Tianjin 300387, China*)

(Received 18 October 2020; revised manuscript received 21 November 2020)

Abstract

First principles calculations are performed to explore the electronic structure and optical properties of BlueP/ $X\text{Te}_2$ ($X = \text{Mo}, \text{W}$) van der Waals heterostructures after biaxial strain has been applied. The type-II band alignments with indirect band gap are obtained in the most stable BlueP/ $X\text{Te}_2$ heterostructures, in which the photon-generated carriers can be effectively separated spatially. The BlueP/ MoTe_2 and BlueP/ WTe_2 heterostructures both have appreciable absorption of infrared light, while the shielding property is enhanced. The increase of biaxial compressive strain induces indirect-direct band gap transition and semiconductor-metal transition when a certain compressive strain is imposed on the heterostructures, moreover, the band gap of the heterostructures shows approximately linear decrease with the compressive strain increasing, and they undergo a transition from indirect band gap type-II to indirect band gap type-I with the increase of biaxial tensile strain. These characteristics provide an attractive possibility of obtaining novel multifunctional devices. We also find that the optical properties of BlueP/ $X\text{Te}_2$ heterostructures can be effectively modulated by biaxial strain. With the increase of compression strain, the absorption edge is red-shifted, the response of light absorption extends to the mid-infrared light and the absorption coefficient increases to 10^{-5} cm^{-1} for the two heterostructures. The BlueP/ MoTe_2 shows stronger light absorption response than the BlueP/ WTe_2 in the mid-infrared to infrared region and the $\varepsilon_1(0)$ increases significantly. The BlueP/ $X\text{Te}_2$ heterostructures exhibit modulation of their band alignment and optical properties by applied biaxial strain. The calculation results not only pave the way for experimental research but also indicate the great potential applications of BlueP/ $X\text{Te}_2$ van der Waals heterostructures in narrow band gap mid-infrared semiconductor materials and photoelectric devices.

Keywords: BlueP/ $X\text{Te}_2$ ($X = \text{Mo}, \text{W}$) van der Waals heterostructures, electronic structure, optical properties, strain

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 79.60.Jv

DOI: 10.7498/aps.70.20201728

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11475212, 11505211, 61204008).

[†] Corresponding author. E-mail: hyxingmail@126.com

[‡] Corresponding author. E-mail: zyguo@ihep.ac.cn