

# 应变和电场对 Ga<sub>2</sub>SeTe/In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 异质结 电子结构和光学性质的影响\*

孙婷钰<sup>1)</sup> 吴量<sup>1)</sup> 何贤娟<sup>1)</sup> 姜楠<sup>1)</sup> 周文哲<sup>1)†</sup> 欧阳方平<sup>1)2)3)‡</sup>

1) (中南大学物理与电子学院, 超微结构与超快过程湖南省重点实验室, 纳米光子学与器件湖南省重点实验室, 长沙 410083)

2) (新疆大学物理与技术学院, 碳基能源化学与利用国家重点实验室, 乌鲁木齐 830046)

3) (中南大学粉末冶金研究院, 粉末冶金国家重点实验室, 长沙 410083)

(2022年11月23日收到; 2023年1月21日收到修改稿)

异质结构的构筑与堆垛是新型二维材料物性调控及应用的有效策略. 基于密度泛函理论的第一性原理计算, 本文研究了4种不同堆叠构型的新型二维 Janus Ga<sub>2</sub>SeTe/In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 范德瓦耳斯异质结的电子结构和光学性质. 4种异质结构型均为II型能带结构的间接带隙半导体, 光致电子的供体和受体材料由二维 In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的极化方向决定. 光吸收度在可见光区域高达25%, 有利于太阳可见光的有效利用. 双轴应变可诱导直接-间接带隙转变, 外加电场能有效调控异质结构带隙, 使AA2叠加构型的带隙从0.195 eV单调增大到0.714 eV, AB2叠加构型的带隙从0.859 eV单调减小到0.058 eV, 两种调控作用下异质结的能带始终保持II型结构. 压缩应变作用下的异质结在波长较短的可见光区域表现出更优异的光吸收能力. 这些研究结果揭示了 Janus Ga<sub>2</sub>SeTe/In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 范德瓦耳斯异质结电子结构的调控机理, 为新型光电器件的设计提供理论指导.

**关键词:** Janus 单层, 范德瓦耳斯异质结, 光电特性, 第一性原理

**PACS:** 63.20.dk, 71.15.Mb, 73.22.-f, 78.20.Ci

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222250

## 1 引言

二维材料由于具备优异的物理性能, 在下一代光电子学、压电器件、自旋电子学等领域中具有巨大的应用价值<sup>[1-5]</sup>, 已经成为当前功能材料关注的热点. 近年来, 许多二维材料如石墨烯<sup>[6,7]</sup>、硅烯<sup>[8]</sup>、黑磷<sup>[9]</sup>、过渡金属硫族化合物 (TMDs)<sup>[10-12]</sup> 等陆续在理论和实验上被报道. 由于这些材料的某些缺陷, 限制了它们的潜在应用价值, 为了推动二维材料的实际应用, 吸附<sup>[13,14]</sup>、应变工程<sup>[15]</sup>、掺杂<sup>[16-18]</sup>、衬底作用<sup>[19]</sup> 和构建异质结构<sup>[20-22]</sup> 等调控手段应

运而生, 其中构建异质结构的方法能够在有效保留其原本优异特性的基础上, 产生许多新奇的物理性能. 目前, 大多数已知的二维层状材料都可以通过不同的堆叠方式形成范德瓦耳斯异质结<sup>[23-25]</sup>, 能够将不同材料的优异性能组合起来, 以弥补单一材料的不足. Almayyali 等<sup>[26]</sup> 报道了二维 PtS<sub>2</sub>/MoS<sub>2</sub> 和 MoSe<sub>2</sub>/PtS<sub>2</sub> 范德瓦耳斯异质结构, 这两种异质结构表现出非常优异的光学和电子性质. Shang 等<sup>[27]</sup> 的研究也表明, InSe 与 InTe 搭建的范德瓦耳斯异质结具有可调控的电子特性, 在光电应用方面有很大的潜力.

已有实验研究证明单层的  $\alpha$ -In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 在室温下

\* 国家自然科学基金 (批准号: 52073308, 12164046)、湖南省杰出青年学者基金 (批准号: 2015JJ1020) 和新疆维吾尔自治区天池特聘教授基金资助的课题.

† 通信作者. E-mail: csuzwz22@csu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: oyfp@csu.edu.cn

保持着面内和面外的固有压电性和铁电性<sup>[28,29]</sup>, 构建异质结时引入铁电极性会形成内建电场, 会带来许多意想不到的性能提升. Chen 等<sup>[30]</sup>发现, 通过构建  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{TMDs}$  异质结构可以增强面外压电系数, 异质结的压电效应也可以通过  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化方向来调控, 这主要是由于两种材料间隙内产生的界面偶极矩引起的, 施加应变可以更大程度地调控这一效应. 此外, 据 Duan 等<sup>[31]</sup>报道, 与原始的单层  $\text{InSe}$  和单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  相比,  $\text{InSe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  范德瓦耳斯异质结从红外光区到可见光区具有更高的光吸收系数, 通过双轴应变以及外加电场可以改变异质结的带隙类型, 实现直接-间接带隙的跃迁; 在调控过程中, 能带对齐情况与  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化方向有着密切的关系, 这是因为铁电极化会导致接触界面电场的出现, 从而引发电荷分布的不对称.

受到 Janus  $\text{MoSSe}$  实验实现的启发, 最近对 Janus III 族二硫化物<sup>[32–34]</sup>进行了理论预测, 结果表明该家族材料具有良好的稳定性、适宜的带隙、高催化活性和较高的光吸收系数, 目前在光电领域备受关注.  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  是 Janus III 族二硫化物家族的一员,  $\text{Ga}$  原子组成的两个原子层被  $\text{Se}$  原子层和  $\text{Te}$  原子层夹在中间. Guo 等<sup>[35]</sup>通过第一性原理计算证明了  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  是热力学和动力学稳定的. Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  的能带结构<sup>[36]</sup>表明, 它是一种直接带隙为 1.21 eV 的半导体. 此外, 由于镜面对称性的破缺, Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  具有固有的面外偶极极化和内建电场. 虽然 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  在紫外区域较高的光吸收度表明了它的潜力, 但较低的可见光吸收度严重限制了它的应用<sup>[36]</sup>. Singh 和 Choudhary<sup>[37]</sup>尝试用过渡金属吸附  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  单层以提高其在可见光区域的光吸收度, 结果表明吸附后的  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  单层在整个可见区域具有较高的吸收峰. 构建异质结构也是一种可以提高材料光电性能的方法, Min 等<sup>[38]</sup>报道了  $\text{Ga}_2\text{TeSe}/\text{InSe}$  异质结构相比原始的单层  $\text{Ga}_2\text{TeSe}$  和单层  $\text{InSe}$  在可见光区域具有更高的光吸收度, 并且在面内和面外应变下始终保持了优异的高光吸收度. 由于二维 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  与单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  具有相似的晶格对称性和较小的晶格失配, 两者非常适合构建异质结, 为了提高 Janus 二维硫化物在电子器件和光电器件领域的应用价值, 对这类异质结的电子性质和光学性质进行比较深入的研究是非常有意义的.

本文构建晶格失配率小于 1% 的二维 Janus

$\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  范德瓦耳斯异质结, 考虑到两种组分材料都具有一定强度的内建电场, 构建了 4 种异质结模型, 探讨了这类异质结的电子结构和光学性质以及相关调控方法. 详细研究了外加电场和双轴应变对这类异质结电子性质和光学性质的影响, 优异的光吸收度在外加电场和双轴应变下始终保持稳定, 这些结果表明此类异质结在实际的工业环境中也有较为稳定的性质, 在下一代新型电子和光电器件应用上有很强的竞争力.

## 2 计算模型与方法

本项工作主要包括了结构优化、电子结构和光学性质的计算, 本文基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 结合投影缀加平面波 (projected augmented wave, PAW) 赝势的第一性原理计算均通过 VASP (Vienna ab-initio simulation package)<sup>[39,40]</sup>进行. 计算中采取 Perdew 等<sup>[41]</sup>提出的广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 作为交换关联泛函. 平面波截止能量设定为 500 eV. 自洽迭代的能量收敛判据为  $10^{-5}$  eV. 考虑到 Janus 结构  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结中两种组分材料界面处存在的范德瓦耳斯相互作用, 在计算中选择 Grimme 的 DFT-D2 方法进行修正<sup>[42,43]</sup>. 使用以  $\Gamma$  为中心的 Monkhorst 和 Pack<sup>[44]</sup>方法生成  $16 \times 16 \times 1$  的  $K$  点网格对第一布里渊区进行采样. 此外, 为了避免面外 ( $z$ ) 方向上的各层之间的相互作用, 在各层异质结之间设置了 25 Å 以上的真空空间. 考虑电场对异质结影响时, 在 INCAR 文件中加入参数  $\text{IDIPOL} = 3$  (表示电场方向沿晶格矢量  $c$  方向),  $\text{EFIELD} = \text{常数}$  (控制施加电场的大小). 面内双轴应变被定义为  $\varepsilon = \Delta a/a_0$ ,  $a_0$  和  $a = a_0 \pm \Delta a$  分别是无应变时和考虑应变后的晶格常数.

根据 VASP 计算出的复介电函数, 利用以下公式计算出光吸收系数  $\alpha(\omega)$ :

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2\omega} \left[ \sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) - \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2}, \quad (1)$$

式中,  $\varepsilon_1$  和  $\varepsilon_2$  分别表示复介电函数的实部和虚部. 因此, 可以通过计算介电函数得到异质结构和孤立单层的光学吸收光谱. 材料的光吸收也由吸光度  $A(E)$  来说明, 它被定义为具有能量  $E = \hbar\omega$  的光子被异质结所吸收的能量的占比<sup>[45–47]</sup>:

$$A(E) = 1 - e^{-\alpha(E)\Delta Z} = 1 - e^{\frac{\varepsilon_2 \omega}{cn} \Delta Z}. \quad (2)$$

结合能 ( $E_b$ ) 被用来确定异质结在不同堆叠中的稳定性. 以  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3\text{-P}_{\text{up}}$  为例, 定义为

$$E_b = E_{\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3\text{-P}_{\text{up}}} - E_{\text{Ga}_2\text{SeTe}} - E_{\text{In}_2\text{Se}_3\text{-P}_{\text{up}}}, \quad (3)$$

其中,  $E_{\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3\text{-P}_{\text{up}}}$ ,  $E_{\text{Ga}_2\text{SeTe}}$  和  $E_{\text{In}_2\text{Se}_3\text{-P}_{\text{up}}}$  分别表示  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3\text{-P}_{\text{up}}$  范德瓦耳斯异质结和原始单层  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  和  $\text{In}_2\text{Se}_3\text{-P}_{\text{up}}$  的总能量.  $\text{In}_2\text{Se}_3\text{-P}_{\text{up}}$  表示电极化向上时的单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$ .

### 3 计算结果与讨论

#### 3.1 Janus $\text{Ga}_2\text{SeTe}$ 单层和 $\text{In}_2\text{Se}_3$ 单层的几何结构和电子性质

首先分析二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  和 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  的晶体结构和电子性质, 已有研究证明这两种二维材料的热力学和动力学稳定性 [35,48]. 图 1 显示了二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  和  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  优化后的晶体结构和能带结构.

单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  和 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  结构优化后的晶格常数分别为 4.11 Å 和 3.98 Å, 带隙值分别为 0.78 eV 和 1.194 eV. 由图 1(c) 和 (d) 可知, 单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的导带底 (CBM) 位于布里渊区  $\Gamma$  点处, 而价带顶 (VBM) 位于布里渊区  $\Gamma$ - $M$  路径上, 可知二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  是一种间接带隙半导体. 与二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  不同的是, Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  是一种直接带隙半导体, 其导带底和价带顶都位于布里渊区的  $\Gamma$  点处. 这两种材料的晶格失配率小于 1%, 所以可以直接使用其原胞来构建异质结构.

#### 3.2 Janus 二维硫化物异质结的稳定性和光电特性

由于二维 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  打破镜面对称性, 存在一定大小的内建电场, 而单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  由于中心 Se 原子层发生移动, 产生自发的面外电极化, 是一种铁电材料. 考虑到两种二维材料极化方向的影响, 构建了 4 种  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  范德瓦耳斯

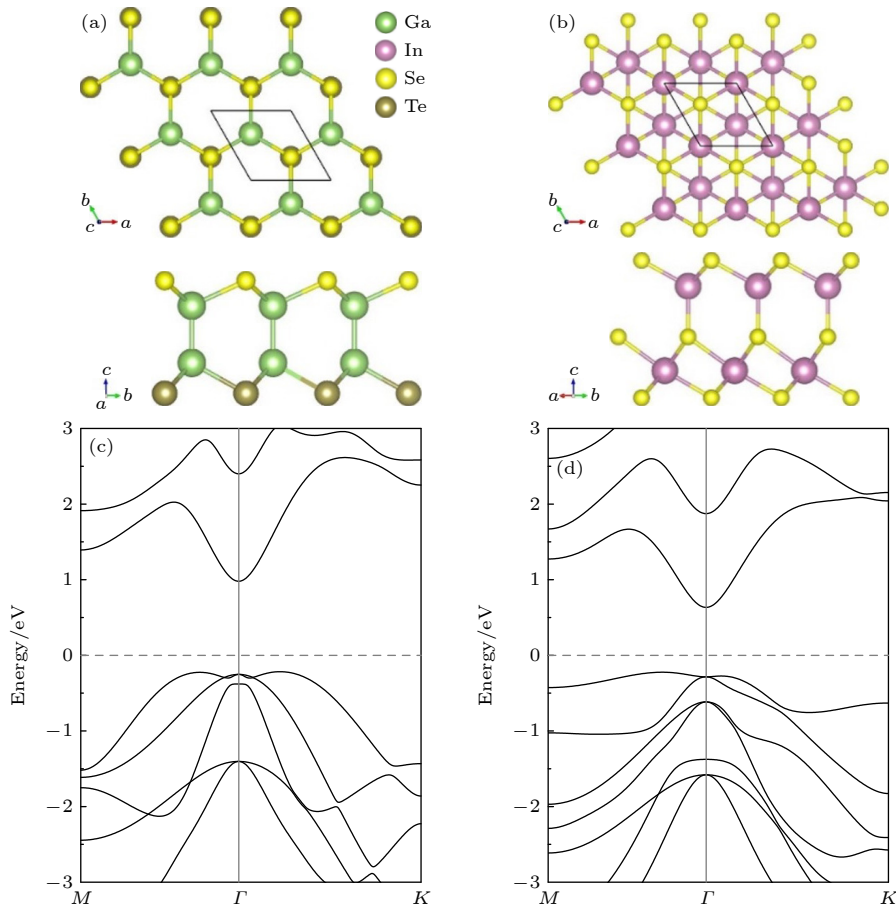


图 1 (a) 二维 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  的俯视图 (上) 和侧视图 (下); (b) 二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的俯视图 (上) 和侧视图 (下); (c) 二维 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  的能带结构图; (d) 二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的能带结构图

Fig. 1. (a) Top view (upper) and side view (lower) of 2 D Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$ ; (b) top view (upper) and side view (lower) of 2 D  $\text{In}_2\text{Se}_3$ ; (c) the energy band structure diagram of two-dimensional Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$ ; (d) energy band structure diagram of two-dimensional  $\text{In}_2\text{Se}_3$ .

垂直异质结模型, 如图 2(a)—(d) 所示. 4 种异质结采用高对称的堆叠模式: 顶部 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  层

的 Ga 原子位于底部二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  接触面处的 Se 原子之上. 当  $\text{In}_2\text{Se}_3$  极性向下时, 接触面为 Te 原子

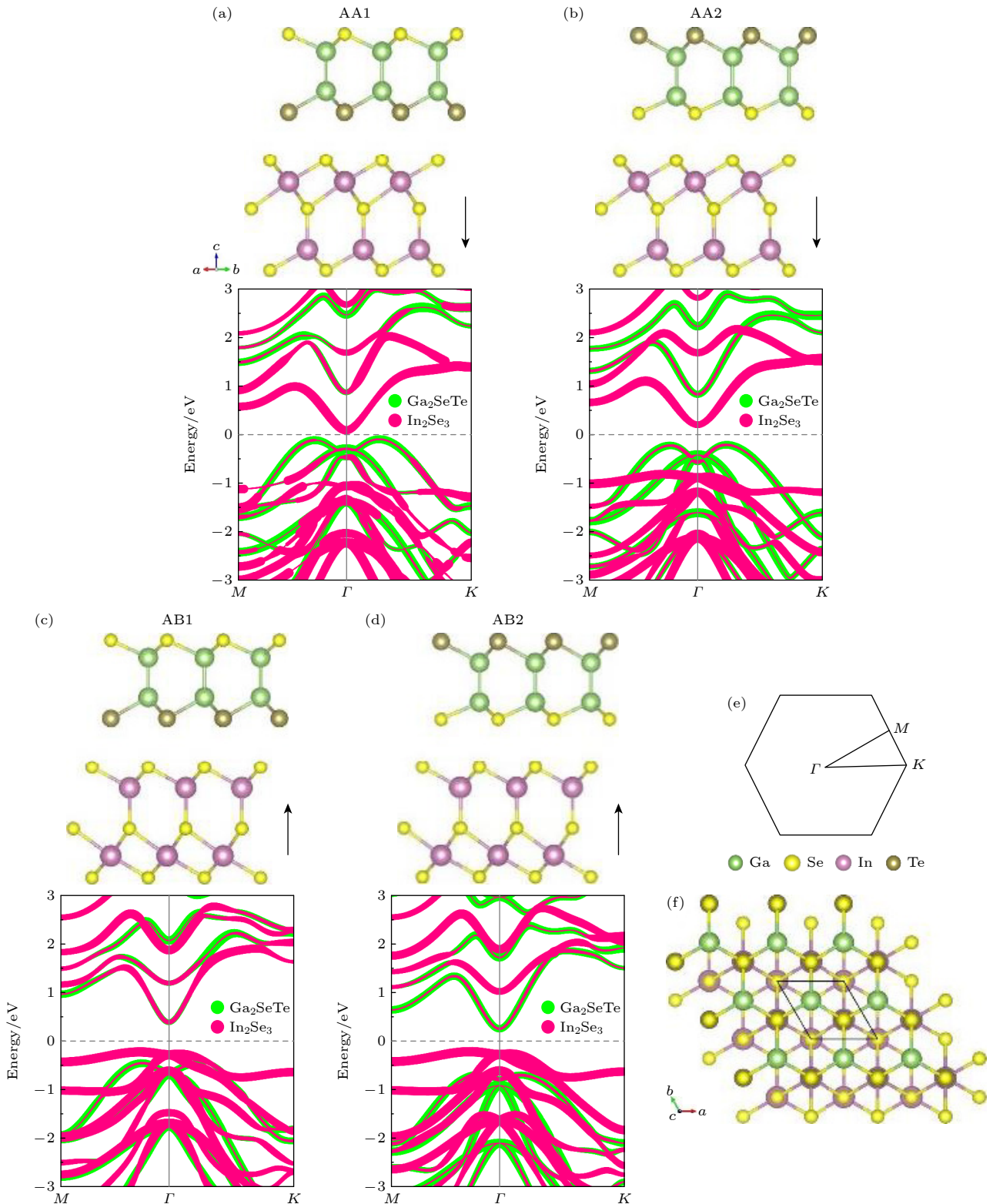


图 2 4 种堆叠构型 (a) AA1, (b) AA2, (c) AB1, (d) AB2 结构侧视图 (上) 及能带结构 (下), 其中绿色为  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  的贡献, 红色为  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的贡献; (e) 相应的布里渊区和高对称点; (f) Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结俯视图

Fig. 2. The structure side view (top) and band structure (bottom) of four stack configurations (a) AA1, (b) AA2, (c) AB1 and (d) AB2, Green is the contribution of  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  and red is  $\text{In}_2\text{Se}_3$ . (e) Corresponding Brillouin zones and points of high symmetry; (f) top view of Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  heterojunction.

的构型为 AA1, 接触面为 Se 原子的构型为 AA2; 当  $\text{In}_2\text{Se}_3$  极性向下时, 接触面为 Te 原子的构型为 AB1, 接触面为 Se 原子的构型为 AB2. 为了检验这 4 种异质结构模型的能量稳定性, 对这 4 种叠加构型进行了基态能和结合能的计算. 表 1 给出了 4 种叠加构型的结合能和带隙, 结合能都为负且足够大, 这意味着 4 种叠加构型都是稳定的.

表 1 4 种 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  范德瓦耳斯异质结的  $E_b$  和带隙 ( $E_g$ )

Table 1.  $E_b$  and band gap ( $E_g$ ) of four Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  Van der Waals heterojunctions.

	AA1	AA2	AB1	AB2
$E_b/\text{eV}$	-2.404	-2.380	-2.392	-2.367
$E_g/\text{eV}$	0.184	0.414	0.611	0.472

进一步计算了 4 种构型异质结 (AA1, AA2, AB1 和 AB2) 的投影能带结构, 如图 2 所示. 4 种

构型异质结的带隙分别为 0.184, 0.414, 0.611 和 0.472 eV, 均小于原本的 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  和  $\text{In}_2\text{Se}_3$  单层的带隙, 其中导带底 (CBM) 都位于布里渊区  $\Gamma$  点, 价带顶 (VBM) 都位于布里渊区  $\Gamma$ -M 路径上, 可知这 4 种异质结构都是间接带隙半导体.

从 4 种堆叠构型 (AA1, AA2, AB1 和 AB2) 的能带结构图中可以看出, 由于二维 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  的极化强度较弱, 影响能带结构的主要因素是二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化方向. 接下来绘制了 4 种 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  范德瓦耳斯异质结的能带对齐图进行进一步分析, 如图 3 所示. 从图 3 可以看出, 当  $\text{In}_2\text{Se}_3$  极性向下时, 即 AA1, AA2 堆叠构型中 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  层的价带顶高于  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层, 而  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层的导带底低于 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  层, 因此 AA1, AA2 堆叠构型的  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结具有交错 II 型能带排列的性质. 而当  $\text{In}_2\text{Se}_3$  极性向上时, 即 AB1, AB2

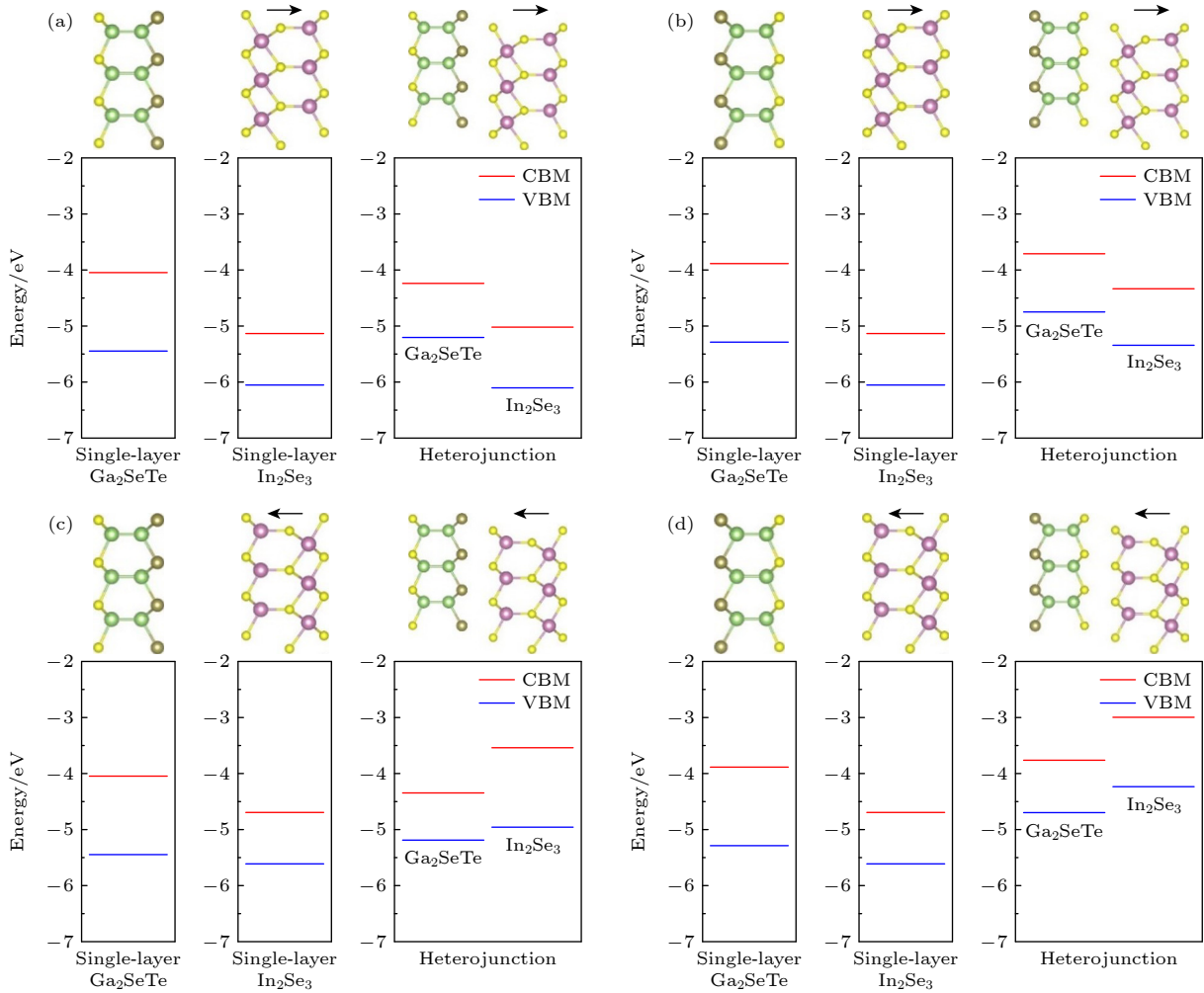


图 3 单层  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$ 、单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$ 、Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结 (a) AA1; (b) AA2; (c) AB1; (d) AB2 堆叠构型的能带对齐图  
 Fig. 3. Band alignment of single-layer  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$ , single-layer  $\text{In}_2\text{Se}_3$ , Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  heterojunction (a) AA1; (b) AA2; (c) AB1; (d) AB2 stack configurations.

堆叠构型的  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结同样具有交错 II 型能带排列, 不同的是在价带顶由  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层贡献, 导带底由 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  贡献. 这是由于  $\text{In}_2\text{Se}_3$  极性方向不同导致的. 当  $\text{In}_2\text{Se}_3$  极性向下时, 即 AA1, AA2 堆叠构型, Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  层在  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层势能高的一侧, 这就导致  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  层的势能比  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层更高, 价带顶和导带底均高于  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层, 从而形成的异质结价带顶由  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  层贡献, 导带底由  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层贡献. 当  $\text{In}_2\text{Se}_3$  极性向上时, 即 AB1, AB2 堆叠构型, Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  层在  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层势能低的一侧, 所得结果也就与极性向下时相反. 与能带结构相比, 异质结的导带偏移  $\Delta E_C$  (异质结中两种材料导带底能量差) 和价带偏移  $\Delta E_V$  (异质结中两种材料价带顶能量差) 在器件设计中更为重要. 4 种堆叠构型 (AA1, AA2, AB1 和 AB2) 的  $\Delta E_C$  分别为 0.781, 0.625, 0.806 和 0.767 eV,  $\Delta E_V$  分别为 0.899, 0.594, 0.231 和 0.463 eV. 在光的照射下,  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  和  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层的价带中的一些电子都能被光激发到相应的导带中. 异质结的 II 型能带对齐情况有利于光致电子-空穴对的分离, 进而延长激子寿命. 在太阳光照射下, 异质结中出现光致电子的材料为受体, 出现光致空穴的材料为供体, 而  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  范德瓦耳斯异质结中的供体和受体材料由二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化方向决定. 这意味着人为改变二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化方向, 就可以改变供体和受体的材料, 使得  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  范德瓦耳斯异质结在太阳能电池的应用中有更优异的表现.

异质结构的光吸收度如图 4 所示, 结果表明与原始的  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  单层和  $\text{In}_2\text{Se}_3$  单层相比, 4 种

$\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结 (AA1, AA2, AB1 和 AB2) 的光吸收度  $A(E)$  从可见光区域到紫外光区域都有明显的增强. 在可见光区域 4 种异质结构的光学吸收度最高达 25%, 在紫外光区域光学吸收度最高达 35%. 特别是 AA1 和 AB1 堆叠构型具有比另两种堆叠构型更强的层间作用, 在可见光区域都有一个较明显的吸收峰, 增强的光吸收度表明  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  范德瓦耳斯异质结比其原始的两种材料更适用于光电器件.  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  单层、 $\text{In}_2\text{Se}_3$  单层、 $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  范德瓦耳斯异质结构 (AA1, AA2, AB1 和 AB2) 的第一吸收峰分别约位于 1.22, 1.14, 0.73, 0.88, 1.05 和 0.85 eV, 说明其光学间隙值与电子间隙值基本吻合. 由于两层间的电子态杂化,  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  范德瓦耳斯异质结构的第一吸收峰较孤立的  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  和  $\text{In}_2\text{Se}_3$  单层结构的第一吸收峰发生了红移. 上述结果表明基于  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结的光伏器件能有效吸收更宽光谱的太阳光, 具有较高的太阳能收集能力.

### 3.3 Janus 二维硫化物异质结在应变和电场调控下的电子结构与光学性质

已有的研究表明双轴应变是一种有效的调控手段<sup>[49]</sup>, 可以调控二维 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  和二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的电子结构, 虽然二者通过层间范德瓦耳斯相互作用垂直堆叠形成异质结, 但较小的晶格失配会产生轻微平面内应变, 这可能导致异质结的电子结构和光学性质发生变化. 除了双轴应变, 外加电场也是调节异质结电子性质和光学性质的有效方法<sup>[50]</sup>. 实验中通常是通过静电门控产生的电场来调节器件的性能.

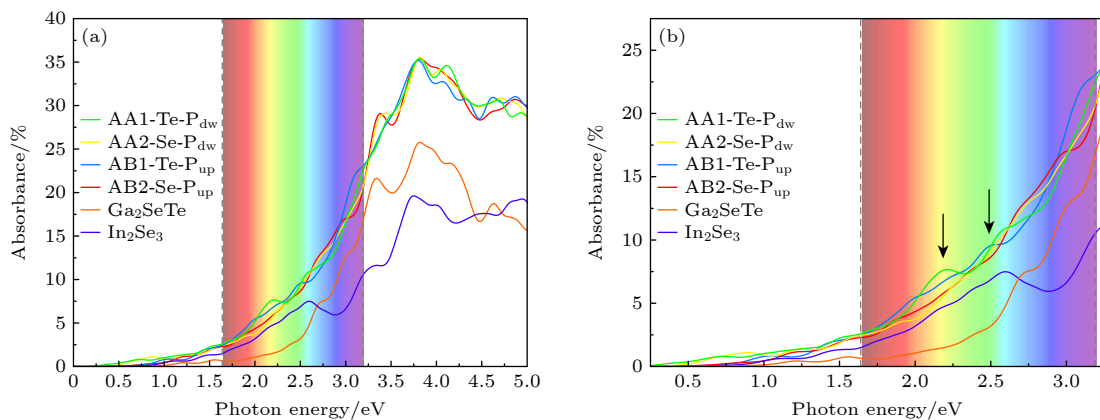


图 4 (a) Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结 AA1, AA2, AB1, AB2 堆叠构型、单层  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$ 、单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的光吸收度; (b) 局部放大图  
 Fig. 4. (a) The light absorption of Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  heterojunction AA1, AA2, AB1, AB2 stacking configuration, monolayer  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$ , monolayer  $\text{In}_2\text{Se}_3$ ; (b) partial magnification.

工作中考虑了从-4%—+4%的双轴应变, 正负号分别表示拉伸应变和压缩应变. 从图 5(b) 可以发现, 当双轴应变变为-4%—+4%时, AB2 叠加构型保持为间接带隙半导体, 带隙从 0.557 eV 单调减小到 0.351 eV. 与 AB2 叠加构型不同的是, AA2 叠加构型的带隙在施加同样大小的双轴应变过程中先增大后减小, 如图 5(a) 所示, 并且在  $\varepsilon = -1\%$  处带隙出现极大值 (0.482 eV), 此外在这个过程中 AA2 叠加构型出现了直接—间接带隙跃迁, 在  $\varepsilon = -1\%$  处是直接带隙向间接带隙转变的地方.

为了进一步研究双轴应变对两种异质结的能带结构造成的影响, 绘制了两种异质结在不同应变情况下的投影能带图, 如图 5(c) 和 (d) 所示,  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结的两种堆叠构型 (AA2, AB2) 在施加-4%—+4%双轴应变范围内, VBM 和 CBM 的贡献者没有发生变化, 这意味着两种叠加构型中  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  和  $\text{In}_2\text{Se}_3$  两组分的 II 型能带排列保持不变, 再一次证实了能带排列主要受  $\text{In}_2\text{Se}_3$  极化方向的影响. 当双轴应变变为-4%—+4%时,

AA2 叠加构型投影能带结构的变化显示导带底在  $\Gamma$  点处保持不变, 而  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  贡献的价带顶从  $\Gamma$  点处转移到  $\Gamma$ - $M$  路径处, 并且出现了明显的层间杂化, 这是直接—间接带隙跃迁的根源. 而 AB2 叠加构型的带隙在上述过程中一直减小, 从投影能带结构的变化可以看出这主要是  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  贡献的导带底向下移动导致的.

以 AA2 叠加构型为例详细分析双轴应变对异质结电子结构的影响. 当异质结受到拉伸应变时, 导致  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层原子轨道之间的作用增强, 极化强度增大, 从  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  层转移到  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层的电荷增多, 从而  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  的能带相对向下移动,  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的能带相对向上移动. 此外, 除了能带的相对移动, 施加应变过程还会导致层内材料带隙的变化, 比如拉伸应变导致  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  的带隙减小, 这两方面的因素共同造成异质结带隙变化, 导带能带偏移减小. 相反的是, 压缩应变减小  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层内的轨道间的相互作用, 从而电荷从  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  层到  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层的转移趋势减缓, 再考虑到压缩应变引发的层内

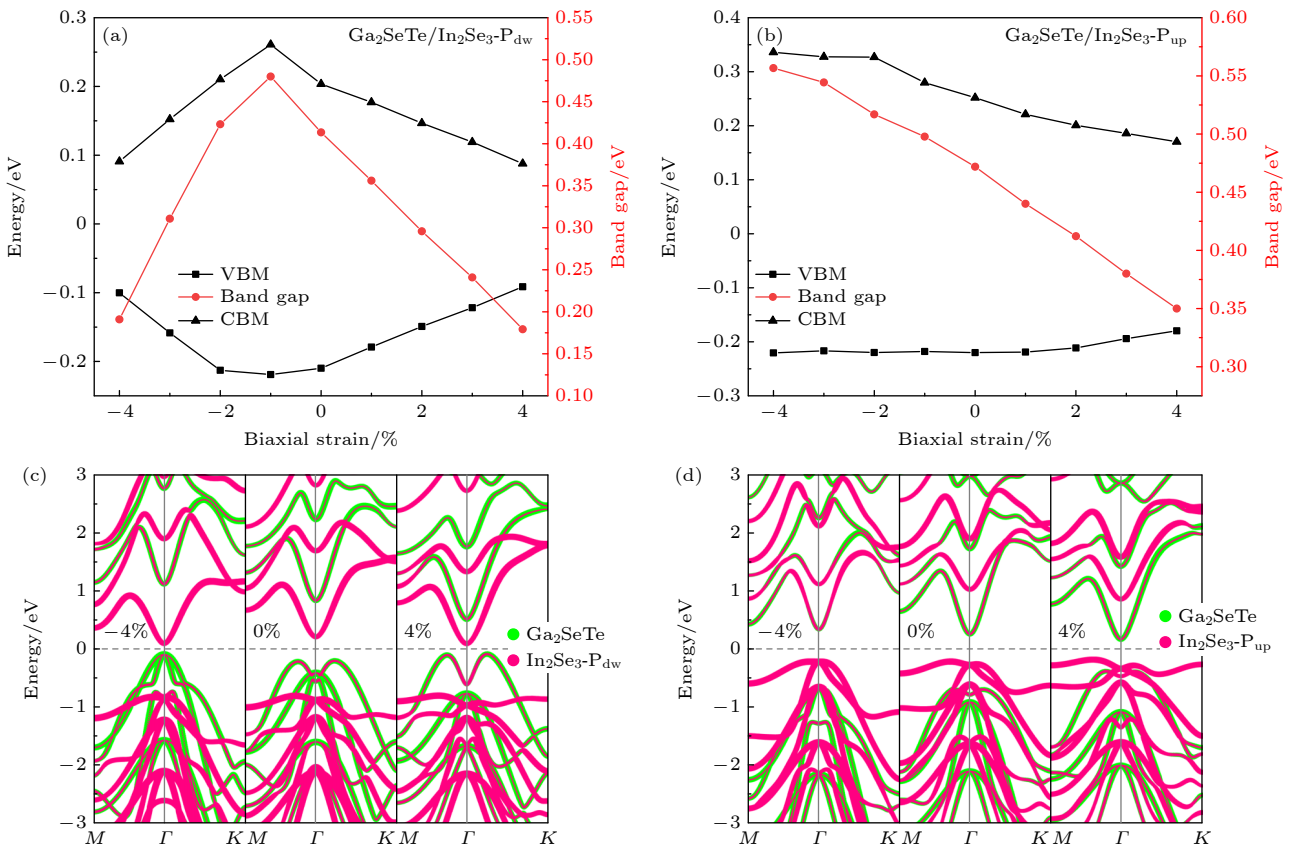


图 5 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结 (a) AA2, (b) AB2 堆叠构型 CBM、VBM 和带隙与双轴应变的函数关系图; 双轴应变下 (c) AA2, (d) AB2 堆叠构型的能带结构

Fig. 5. Function of Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  heterojunction (a) AA2, (b) AB2 stacked configuration CBM, VBM and Band gap with biaxial strain; band structure of (c) AA2, (d) AB2 stacked configuration under biaxial strain.

材料的带隙变化, 增大能带偏移, 从而减小带隙. 上述情况意味着双轴应变可以有效调制异质结的电子性质.

此外, 本项工作还研究了外加电场对 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  范德瓦耳斯异质结构的影响. 电场的正方向定义为  $\text{In}_2\text{Se}_3$  指向  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  的方向, 范围为  $-0.4 \sim +0.4 \text{ V/\AA}$ . Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结的两种堆叠构型 (AA2, AB2) 在不同电场下的带隙变化如图 6(a) 和 (b) 所示, 很明显外加电场可以有效地调节两种异质结的带隙大小. 当外加电场为  $-0.4 \sim +0.4 \text{ V/\AA}$  时, AA2 叠加构型的带隙单调增大, 从  $0.195 \text{ eV}$  增大到  $0.714 \text{ eV}$ . 相反的是, AB2 叠加构型的带隙在这一过程中从  $0.859 \text{ eV}$  单调减小到  $0.058 \text{ eV}$ . 可以看出与双轴应变相比, 外加电场对这两种异质结带隙的影响要大得多. 图 6(c) 和 (d) 为两种异质结在不同电场条件下的投影能带图, 两种异质结在  $-0.4 \sim +0.4 \text{ V/\AA}$  的电场下 II 型能带排列保持不变. 虽然电场能有效调节异质结带隙大小, 但两种叠加构型都没有出现直

接-间接带隙转变, 始终保持为间接带隙半导体. AA2 叠加构型的带隙在上述过程中一直增大, 这主要是  $\text{In}_2\text{Se}_3$  贡献的导带底向上移动导致的. 对于 AB2 叠加构型而言, 正电场减小其带隙, 负电场增大其带隙, 这与  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  在导带底的贡献密切相关.

与双轴应变调控不同, 外加电场对两种异质结的  $\Delta E_C$  (异质结中两种材料导带底能量差) 和  $\Delta E_V$  (异质结中两种材料价带顶能量差) 都有较大的影响, 从而对带隙的调控作用比较明显. 从投影能带可以看出, 对于 AA2 叠加构型而言, 正电场抑制能带偏移, 负电场增强能带偏移, 而 AB2 叠加构型完全相反. 进一步探讨外加电场调控两种异质结构模型的电子性质的物理起源, 从电偶极子和电荷转移进行分析. Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  中的电偶极子包括本征偶极子和界面偶极子两部分, 其中本征偶极子主要是由  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层内固有的电偶极子产生, 而界面偶极子是由  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结中接触界面上的电荷重新分布导致的. 对于 AA2 叠加构型

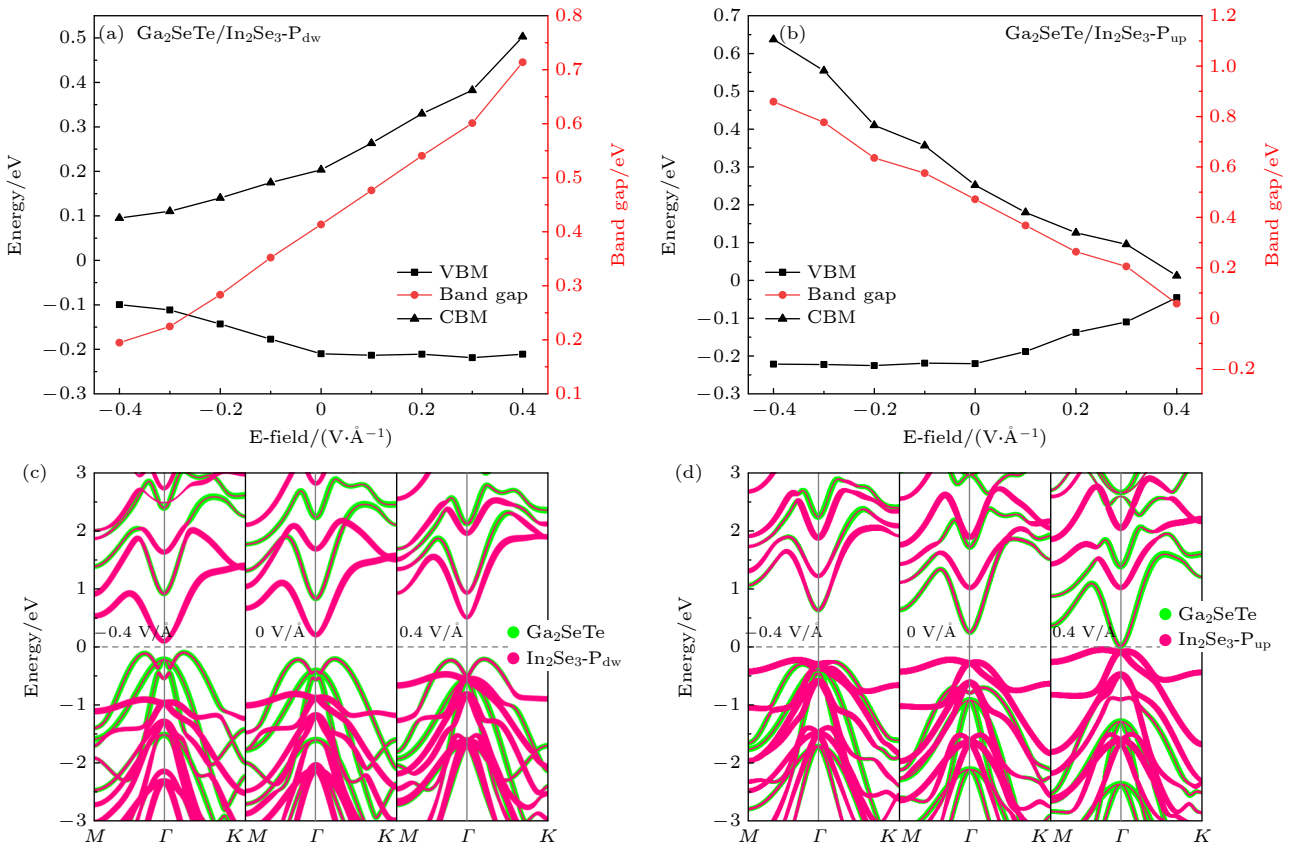


图 6 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结 (a) AA2, (b) AB2 堆叠构型 CBM, VBM 和带隙与外加电场的函数关系图, 外加电场下 (c) AA2, (d) AB2 堆叠构型的能带结构

Fig. 6. Function of Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  heterojunction (a) AA2, (b) AB2 stacked configuration CBM, VBM and band gap with external electric field, band structure of (c) AA2, (d) AB2 stacked configuration under external electric field.

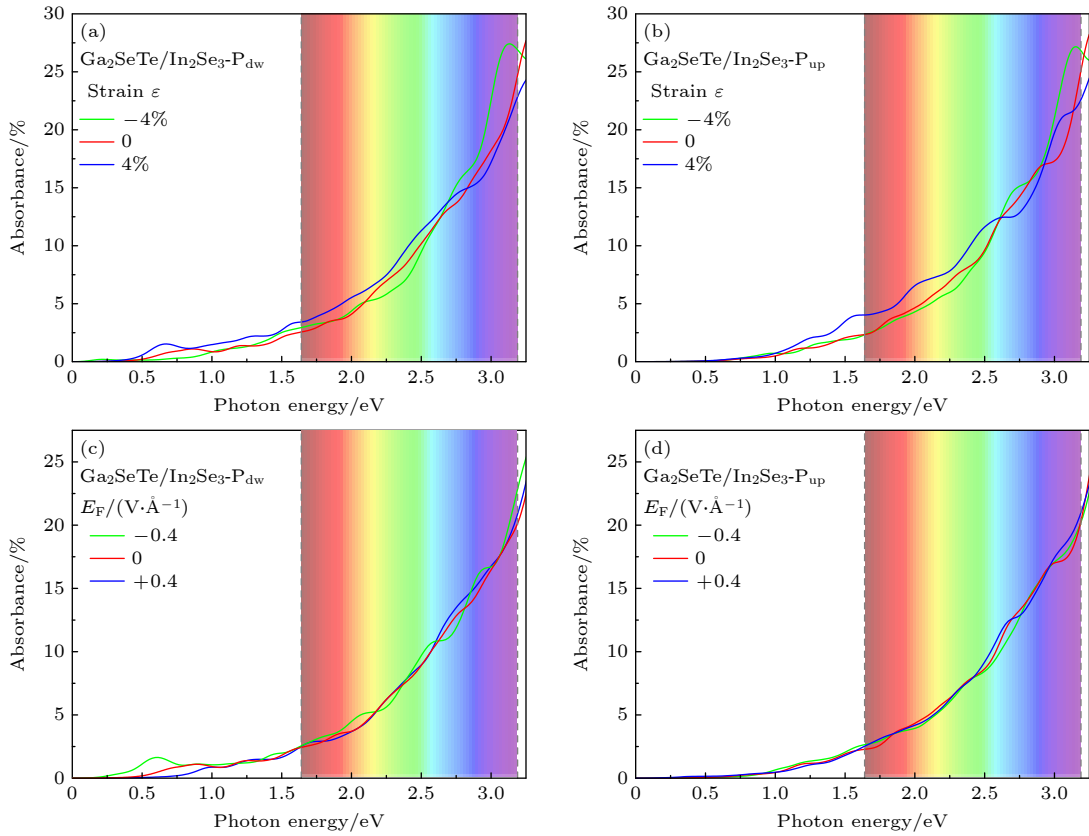


图 7 双轴应变为-4%, 0%, 4% 下 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结 (a) AA2, (b) AB2 堆叠构型的光吸收度; 外加电场为-0.4, 0.4  $\text{V}/\text{\AA}$  下  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结 (c) AA2, (d) AB2 堆叠构型的光吸收度

Fig. 7. The light absorption of Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  heterojunction (a) AA2, (b) AB2 stack configuration under biaxial strain of -4%, 0% and 4%. The optical absorption of  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  heterojunction (c) AA2, (d) AB2 stack configuration under applied electric field of -0.4, 0, 0.4  $\text{V}/\text{\AA}$ .

而言, 当负电场作用于异质结时, 由于电场方向与  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层相同, 内建电场增强, 驱使更多电荷从  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  层向  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层转移, 从而  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  的能带相对向下移动,  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的能带相对向上移动, 从而导致带隙减小, 能带偏移增大的结果. 相反的是, 正电场与  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层的内建电场方向相反, 减弱了电荷从  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  层到  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层的转移, 从而减小带隙, 增大能带偏移. 而对于 AB2 叠加构型而言,  $\text{In}_2\text{Se}_3$  层极化方向与 AA2 构型的相反, 正负电场的作用也就导致了与 AA2 相反的结果. 这为利用外加电场调制异质结的界面状态提供了实验可行性.

在-4%—+4% 的应变范围内, 如图 7(a) 和 (b) 所示, 与无应变情况相比, AA2, AB2 两种堆叠构型仍保持了高达 25% 的高光吸收度和从可见光区到紫外光区的宽吸收区. 当入射光子能量为 3.1 eV 时, AA2 和 AB2 两种堆叠构型在-4% 应变情况下都出现了一个明显的吸收峰, 说明在短波长可见光区域对两种堆叠构型施加压缩应变可以获得更高

的光吸收度. 这意味着即使在器件设计中出现晶格失配引起的面内应变,  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结的这两种构型也具有优异的电子和光学性能. 从图 7(c) 和 (d) 可以看出, 两种异质结的高光吸收度  $A(E)$  对外加电场并不敏感, 在可见光区域没有明显增大, 但仍维持在 25% 以上的较高水平. 随着外加电场从-0.4  $\text{V}/\text{\AA}$  增大到 0  $\text{V}/\text{\AA}$  再增大到 0.4  $\text{V}/\text{\AA}$ , AA2 堆叠构型的第一吸收峰分别约位于入射光子能量为 0.62, 0.89 和 0.99 eV 处, 其光学间隙值与电子间隙值比较吻合, 说明这几个吸收峰主要与层间耦合有关.

## 4 结 论

本文研究了 Janus 二维硫化物异质结的电子结构和光学性质以及双轴应变和外加电场对它的影响. 异质结组分材料选用晶格失配率非常小的二维 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  和二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$ , 基于二维 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}$  和二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的内建电场构建

了四种堆叠构型的异质结构, 这类异质结结构稳定, 相比组分材料表现出更优异的光学性质, 组分材料中的二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的内建电场决定了能带结构和能带对齐. 在双轴应变作用下, Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结的电子结构和光学性质发生了明显变化, 压缩应变作用下的异质结在可见光波长较短区域表现出更优异的光吸收能力, AA2 堆叠构型出现了直接-间接带隙跃迁, 双轴应变影响此类异质结的电子结构主要体现在不同材料层间的电荷转移和层内组分材料本身电子结构的变化. 外加电场作用下, 此类异质结仍表现出优异的光学性质, 外加电场主要影响了异质结中接触界面上的电荷分布, 从而实现 Janus  $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结电子结构的有效调控.

## 参考文献

- [1] Butler S Z, Hollen S M, Cap L, et al. 2013 *ACS Nano* **7** 2898
- [2] Das S, Robinson J A, Dubey M, et al. 2015 *Annu. Rev. Mater. Res.* **45** 1
- [3] Zhu B, Zhang X, Zeng B, et al. 2017 *Org. Electron.* **49** 45
- [4] OuYang F P, Xu H, Fan T 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 064501
- [5] Chen J Y, Li X X, Zhou W Z, et al. 2020 *Adv. Electron. Mater.* **6** 1900490
- [6] Neto A H C, Guinea F, Peres N M R, et al. 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [7] OuYang F P, Xu Hui, Wei Chen 2008 *Acta Phys. Sin. Ch. Ed.* **57** 1073
- [8] Feng B J, Ding Z J, Meng S, et al. 2012 *Nano Lett.* **12** 3507
- [9] Qiao J, Kong X, Hu Z X, et al. 2014 *Nat. Commun.* **5** 4475
- [10] Xiao J, Long M Q, Li X M, et al. 2014 *J. Phys. Condens. Matter* **26** 405302
- [11] Zhu P, Chen Y, Zhou Y, et al. 2018 *Int. J. Hydrog. Energy* **43** 14087
- [12] Wu D, Shi J, Zheng X, et al. 2019 *Phys. Status Solidi Rapid Res. Lett.* **13** 1900063
- [13] Zhu J, Ha E, Zhao G L, et al. 2017 *Coord. Chem. Rev.* **352** 306
- [14] Ouyang F P, Ni X, Yang Z X, et al. 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 213701
- [15] Hu Y, Zhang S, Sun S, et al. 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 122107
- [16] Guo G, Shi Y, Zhang Y, et al. 2020 *Comput. Mater. Sci.* **172** 109348
- [17] Chen L N, OuYang F P, Ma S S, et al. 2010 *Phys. Lett. A* **374** 4343
- [18] Xiao J, Yang Z X, Xie W T, et al. 2012 *Chin. Phys. B* **21** 027102
- [19] Zhou W Z, Yang Z X, Li A L, et al. 2020 *Phys. Rev. B* **101** 045113
- [20] Chen H, Li Y, Huang L, et al. 2015 *J. Phys. Chem. C* **119** 29148
- [21] Long R, Prezhdoo O. V 2016 *Nano Lett.* **16** 1996
- [22] Ahmad W, Liu J, Jiang J, et al. 2021 *Adv. Funct. Mater.* **31** 2104143
- [23] Geim, Andre K, Grigorieva I V 2013 *Nature* **499** 419
- [24] Novoselov K S, Mishchenko A, Carvalho A, et al. 2016 *Science* **353** aac9439
- [25] Zhu Z, Zhang B, Chen X, et al. 2020 *Appl. Phys. Lett.* **117** 082902
- [26] Almayyali, Ali Obies Muhsen, Bahjat B Kadhim, et al. 2020 *Chem. Phys.* **532** 110679
- [27] Shang J, Pan L, Wang X, et al. 2018 *J. Mater. Chem. C* **6** 7201
- [28] Ding W J, Zhu J B, Wang Z, et al. 2017 *Nat. Commun.* **8** 14956
- [29] Hu L, Huang X 2017 *RSC Adv.* **7** 55034
- [30] Chen Y, Tang Z, Shan H, et al. 2021 *Phys. Rev. B* **104** 075449
- [31] Duan X, Tang S, Huang Z 2021 *Comput. Mater. Sci.* **200** 110819
- [32] Li R, Li L, Cheng Y, et al. 2018 *Small* **14** 1802091
- [33] Ibarra-Hernández W, Elsayed H, Romero A H, et al. 2017 *Phys. Rev. B* **96** 035201
- [34] Kandemir A, Sahin H 2018 *Phys. Rev. B* **97** 155410
- [35] Guo Y, Zhou S, Bai Y, et al. 2017 *Appl. Phys. Lett.* **110** 163102
- [36] Bui H D, Jappor H R, Hieu N N 2019 *Superlattices Microstruct.* **125** 1
- [37] Singh S, Choudhary S 2022 *Eur. Phys. J. D* **76** 1
- [38] Min J, Zhou M, Zhang C, et al. 2021 *Phys. Lett. A* **413** 127594
- [39] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15
- [40] Kresse G, Furthmüller J, Hafner J 1994 *Phys. Rev. B* **50** 13181
- [41] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [42] Kerber T, Sierka M, Sauer J 2008 *J. Comput. Chem.* **29** 2088
- [43] Grimme S 2006 *J. Comput. Chem.* **27** 1787
- [44] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [45] Bernardi M, Palummo M, Grossman J C 2013 *Nano Lett.* **13** 3664
- [46] Huang B, Deng H X, Lee H, et al. 2014 *Phys. Rev. X* **4** 021029
- [47] Shi G, Kioupakis E 2015 *Nano Lett.* **15** 6926
- [48] Tao X, Gu Y 2013 *Nano Lett.* **13** 3501
- [49] Zhang W X, Shi C H, He C, et al. 2020 *J. Solid State Chem.* **289** 121511
- [50] Li X, Zhai B, Song X, et al. 2020 *Appl. Surf. Sci.* **509** 145317

# Effect of strain and electric field on electronic structure and optical properties of Ga<sub>2</sub>SeTe/In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> heterojunction\*

Sun Ting-Yu<sup>1)</sup> Wu Liang<sup>1)</sup> He Xian-Juan<sup>1)</sup> Jiang Nan<sup>1)</sup>

Zhou Wen-Zhe<sup>1)†</sup> Ouyang Fang-Ping<sup>1)2)3)‡</sup>

1) (*School of Physics and Electronics, Human Key Laboratory for Super-Microstructure and Ultrafast Process, Hunan Key Laboratory of Nanophotonics and Devices, Central South University, Changsha 410083, China*)

2) (*School of Physics and Technology, State Key Laboratory Of Chemistry And Utilization Of Carbon Based Energy Resources, Xinjiang University, Urumqi 830046, China*)

3) (*State Key Laboratory of Powder Metallurgy, and Powder Metallurgy Research Institute, Central South University, Changsha 410083, China*)

( Received 23 November 2022; revised manuscript received 21 January 2023 )

## Abstract

Stacking two-dimensional materials into heterogeneous structures is an effective strategy to regulate their physical properties and enrich their applications in modern nanoelectronics. The electronic structure and optical properties of a new two-dimensional Janus Ga<sub>2</sub>SeTe/In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> heterojunction with four stacked configurations are investigated by first principles calculations. The heterojunction of the four configurations is an indirect band-gap semiconductor with a type-II band structure, and the photoelectron donor and acceptor materials are determined by the polarization direction of two-dimensional In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>. The light absorption rises to 25% in the visible region, which is conducive to the effective utilization of the solar visible light. The biaxial strain can induce direct-indirect bandgap transition, and the applied electric field can effectively regulate the bandgap of heterogeneous structure. The bandgap of AA2 configuration increases monotonically from 0.195 eV to 0.714 eV, but that of AB2 configuration decreases monotonically from 0.859 eV to 0.058 eV. The band of the heterojunction always maintains the type-II structure under the two kinds of configurations. The heterojunctions under compressive strain show better light absorption capability in the visible region with shorter wavelength. These results reveal the regulatory mechanism of the Janus Ga<sub>2</sub>SeTe/In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> van der Waals heterojunction electronic structure and provide theoretical guidance in designing novel optoelectronic devices.

**Keywords:** Janus single layer, Van der Waals heterojunction, photoelectric characteristics, first principles

**PACS:** 63.20.dk, 71.15.Mb, 73.22.-f, 78.20.Ci

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222250

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 52073308, 12164046), the Distinguished Young Scholar Foundation of Hunan Province, China(Grant No. 2015JJ1020), and the Tianchi Distinguished Professor Fund of Xinjiang Uygur Autonomous Region.

† Corresponding author. E-mail: [csuzwz22@csu.edu.cn](mailto:csuzwz22@csu.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [oyfp@csu.edu.cn](mailto:oyfp@csu.edu.cn)

应变和电场对Ga<sub>2</sub>SeTe/In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>异质结电子结构和光学性质的影响

孙婷钰 吴量 何贤娟 姜楠 周文哲 欧阳方平

**Effect of strain and electric field on electronic structure and optical properties of Ga<sub>2</sub>SeTe/In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> heterojunction**

Sun Ting-Yu Wu Liang He Xian-Juan Jiang Nan Zhou Wen-Zhe Ouyang Fang-Ping

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 076301 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20222250

CSTR:  $\{\text{metaArticle.multidivStyle}\}$

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222250>

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

氯化铋/铯铅氯范德瓦耳斯异质结环境稳定性与光电性质的第一性原理研究

A first-principles study on environmental stability and optoelectronic properties of bismuth oxychloride/ cesium lead chloride van der Waals heterojunctions

物理学报. 2022, 71(19): 197901 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220544>

钙钛矿CsPbX<sub>3</sub>(X=Cl, Br, I)与五环石墨烯范德瓦耳斯异质结的界面相互作用和光电性能的第一性原理研究

First principle calculations of interface interactions and photoelectric properties of perovskite CsPbX<sub>3</sub> (X=Cl, Br, I) and pentagraphene van der Waals heterostructures

物理学报. 2021, 70(5): 056301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201246>

CuPc/MoS<sub>2</sub>范德瓦耳斯异质结荧光特性

Photoluminescence properties of CuPc/MoS<sub>2</sub> van der Waals heterostructure

物理学报. 2022, 71(12): 128103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220132>

As/HfS<sub>2</sub>范德瓦耳斯异质结电子光学特性及量子调控效应

Electronic and optical properties and quantum tuning effects of As/HfS<sub>2</sub> van der Waals heterostructure

物理学报. 2022, 71(17): 177304 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220371>

二维铁电In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>/InSe垂直异质结能带的应力调控

Strain control of two-dimensional ferroelectric In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>/InSe vertical heterojunction energy band

物理学报. 2021, 70(22): 227701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211158>

二维平面和范德瓦耳斯异质结的可控制备与光电应用

Controllable preparation and photoelectric applications of two-dimensional in-plane and van der Waals heterostructures

物理学报. 2021, 70(2): 027901 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201419>