

# S 型异质结 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC 电子及光学特性的第一性原理研究\*

赵娜娜<sup>1)2)†</sup> 王佳敏<sup>1)2)</sup> 袁志浩<sup>3)</sup> 崔真<sup>4)</sup> 任聪聪<sup>1)2)</sup>

1) (西安理工大学材料科学与工程学院, 西安 710048)

2) (复合材料及其产品智能制造技术国际联合研究中心, 西安 710048)

3) (西安理工大学理学院, 西安 710054)

4) (西安理工大学自动化与信息工程学院, 西安 710048)

(2023 年 5 月 23 日收到; 2023 年 8 月 18 日收到修改稿)

采用第一性原理计算方法研究了 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC 异质结, 对其进行结构、电子及光学特性的计算, 并探究施加不同双轴应变和垂直电场对异质结能带结构及光吸收特性的影响, 研究表明: MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC 异质结是一种带隙为 1.25 eV 的间接带隙半导体, 具有由 GeC 层指向 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 层的内建电场. 此外, 其光生载流子转移机制符合 S 型异质结机理, 从而提高了光催化水分解的氧化还原电位, 使其满足 pH = 0—14 范围内的光催化水分解要求. 双轴应变下, 带隙随压缩应变的增加而先增大再减小, 且在紫外区域的光吸收性能随压缩应变的增加而增强. 带隙随拉伸应变的增大而减小, 且可见光区域的光吸收性能较压缩应变时增强. 垂直电场下, 带隙随正电场的增加而增大, 随负电场的增大而减小. 综上, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC 异质结可以作为一种高效的光催化材料应用于光电器件及光催化等领域.

**关键词:** S 型异质结, 光催化水分解, 双轴应变调控, 垂直电场调控

**PACS:** 61.82.Fk, 31.15.es, 36.20.Kd

**DOI:** 10.7498/aps.72.20230836

## 1 引言

传统燃料的大量使用导致环境问题越发严峻, 开发无污染的可再生能源刻不容缓. 光催化水分解技术利用光能将水分解为氧气和氢燃料, 是改善环境污染和解决能源短缺问题的一种有效途径. 近年来, 随着实验技术的不断升级, 研究学者们成功制备了越来越多的光催化材料, 并在光催化领域发挥着举足轻重的作用. 常见的光催化材料有 TiO<sub>2</sub><sup>[1]</sup>, ZnO<sup>[2]</sup>, CeO<sub>2</sub><sup>[3]</sup> 和 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub><sup>[4,5]</sup> 等, 其中, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 光催化材料因其具有良好的稳定性和高载流子迁

移率在半导体纳米器件中拥有广泛的应用前景. Hong<sup>[6,7]</sup> 等通过化学气相沉积法合成了一种新型二维 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 纳米材料, 其电子和空穴迁移率分别为 270 和 1200 cm<sup>2</sup>/(V·s). 然而, 单一的 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 难以在碱性环境下满足光催化水分解的要求且对可见光吸收较差. 为了解决以上问题, 改善其光催化性能和光吸收特性, 研究人员采用多种方法对其进行修饰, 例如添加缺陷<sup>[8]</sup>、掺杂<sup>[9,10]</sup>、控制纳米结构或构建异质结<sup>[11–13]</sup> 等, 以提高光生载流子的迁移率和对可见光的吸收能力. 其中, 构建异质结能有效分离电子-空穴对并耦合各组分的优势<sup>[14,15]</sup>. 特别是, 范德瓦耳斯异质结 (van der Waals, vdWs)

\* 国家自然科学基金 (批准号: 52274395, U20A20235)、陕西省重点研发计划 (批准号: 2018ZDXM-GY-139) 和中国博士后科学基金 (批准号: 2018M633542) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhaonasam2007@163.com

能将不同二维层状材料通过范德瓦耳斯搭建在一起, 所得材料可超越原始单层材料在电子特性、光催化和光吸收等方面的性能, 在光电器件<sup>[16,17]</sup>和光催化<sup>[18]</sup>等领域发挥着重要作用.

目前, 通过构建二维  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  基异质结的方式正逐渐成为光催化领域的研究热点. Fang 等<sup>[19]</sup>将  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  与单层蓝磷组合形成异质结, 其电子特性对堆垛模式不敏感. 但施加强电场后, 异质结从半导体转变成金属, 施加双轴应变后能带结构从 II 型转换为 I 型. Liu 等<sup>[20]</sup>构建出  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$  vdWs 异质结, 当层间距离大于平衡距离时, 其带隙几乎不变, 表明层间相互作用太弱并未影响电子性能, 且其在可见光和紫外区表现出较强的光吸收能力. 尽管关于  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  基异质结的相关研究已取得一定进展, 但对于提高其光催化性能仍是研究学者聚焦的热点话题. 近年来, S 型异质结由于具有较高的光生载流子迁移效率在光催化材料领域引起广泛关注. S 型异质结能在强氧化还原能力下实现光生载流子在空间上的分离, 从而显著提高异质结光催化效率. 罗铖等<sup>[21]</sup>构建的  $\text{g-C}_3\text{N}_4/\text{BiOCl}$  异质结光生载流子的转移机制为 S 型异质结机理.  $\text{BiOCl}$  导带 (conduction band, CB) 的光生电子与  $\text{g-C}_3\text{N}_4$  价带 (valence band, VB) 的光生空穴复合, 而  $\text{g-C}_3\text{N}_4$  上 CB 处的电子与  $\text{BiOCl}$  上 VB 处的空穴得以保留, 从而有效实现了光生载流子的分离. 梅子慧等<sup>[22]</sup>构建出的  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4/\text{TiO}_2$  S 型异质结在光激发下, 光生载流子以非辐射跃迁的方式发生能量转移, 从而相对于单一  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$  和  $\text{TiO}_2$  材料而言, 其光催化制氢性能得到明显提高.

基于上述 S 型异质结的研究, 本文拟构建  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  基 S 型异质结. 其中,  $\text{GeC}$  是一种具有 2—3 eV 直接带隙的潜在光电和光伏材料<sup>[23,24]</sup>, 其物理特性可与石墨烯相媲美, 且在应变条件下可实现直接带隙与间接带隙的转变. 此外,  $\text{GeC}$  具有优异的电催化性能<sup>[24]</sup>, 单层  $\text{g-GeC}$  可用作锂离子电池和燃料电池中的阴极催化剂<sup>[25]</sup>. 由于  $\text{GeC}$  和  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  单层材料都具有六元环蜂窝状结构, 这对于将二者耦合形成  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs S 型异质结, 以研究其电子及光学特性给予了一定启发, 从而有望改善单一材料的光催化性能. 就目前对于  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  基异质结的研究而言,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs S 型异质结的研究鲜有报道, 进一步探究其在光催化水分解领域的性能显得尤为重要.

本文以二维材料  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结

为研究对象, 利用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法研究该异质结的电子及光学特性. 首先, 通过计算其能带结构、静电势、平均平面电荷密度研究其电子特性. 其次, 通过研究光生载流子转移机制、光吸收以及光催化水分解性能以明晰其光学特性. 最后, 探究施加不同双轴应变和垂直电场下  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结能带结构和光吸收性能的变化规律, 从而为制备新型且高效的  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  基异质结光催化材料和提高  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  二维材料在光催化领域的应用前景提供理论指导.

## 2 计算方法

采用基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的第一性原理计算方法, 所有计算均在维也纳从头计算模拟程序包<sup>[26]</sup> (Vienna *ab-initio* simulation package, VASP) 中实现. 用投影缀加波 (projector augmented wave, PAW)<sup>[27]</sup> 来描述电子与离子之间的相互作用; 利用基于广义梯度近似泛函 (generalized gradient approximation, GGA) 和 Perdew Burke Ernzerhof (PBE) 泛函<sup>[28]</sup> 来描述电子间的交换相关势. 平面波截止能选为 500 eV, 布里渊区的  $K$  点采用  $9 \times 9 \times 1$  的 Monkhorst-Pack 型网络均匀划分. 能量收敛参数设为  $10^{-5}$  eV, 原子力收敛设为  $10^{-2}$  eV. 在本文所有模型构建过程中,  $X$  与  $Y$  方向设为二维平面内的方向, 二维平面的法向设为  $Z$  方向. 由于第一性原理计算方法使用周期性边界条件, 因此在  $Z$  方向上设置了 20 Å 的真空层, 以避免层与层之间的相互作用对计算结果的影响.

## 3 结果与讨论

### 3.1 $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$ vdWs 异质结的结构和电子特性

$\text{MoSi}_2\text{N}_4$  和  $\text{GeC}$  单层的俯视图和侧视图如图 1 所示, 从俯视图可以看出, 二者均由六元环蜂窝状结构构成. 如图 1(a) 所示,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  单层是由 Mo, Si 和 N 三种原子相连组成的七原子层, 可将其视为 Si—N 层、Mo—N 层、Si—N 层依次堆叠所组成的“三明治”结构. 如图 1(b) 所示,  $\text{GeC}$  单层中 Ge 原子以共价键形式与相邻的 3 个 C 原子相连. 结构优化后, 计算参数在表 1 列出.  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  和  $\text{GeC}$  单层的晶格常数分别为  $a = 2.910$  Å 和

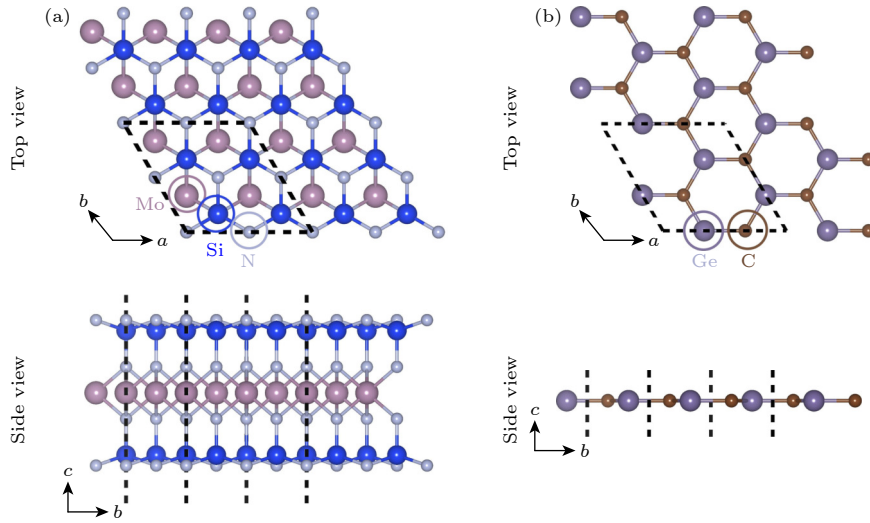


图 1 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 和 GeC 单层的俯视图和侧视图 (a) MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>; (b) GeC

Fig. 1. Top and side views of MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> and GeC monolayer: (a) MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>; (b) GeC.

表 1 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 和 GeC 的带隙 ( $E_g$ )、功函数 ( $\Phi$ )、晶格常数 ( $a$ ) 以及 Ge—C, Mo—N 和两种不同 Si—N 的键长  $d_g$  ( $T_1$  和  $T_2$  分别代表两种不同的 Si—N 键键长)

Table 1. Band gap ( $E_g$ ), work function ( $\Phi$ ), lattice constants ( $a$ ) of MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> and GeC and Ge—C, Mo—N and two different Si—N bond lengths ( $d_g$ ) ( $T_1$  and  $T_2$  represent two different Si—N bond lengths, respectively).

	$E_g/\text{eV}$	$\Phi/\text{eV}$	$a/\text{\AA}$	$d_g/\text{\AA}$			
				Ge—C	Mo—N	$T_1$	$T_2$
MoSi <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	1.80	5.20	2.910	—	2.096	1.747	1.755
GeC	2.07	4.63	3.265	1.883	—	—	—

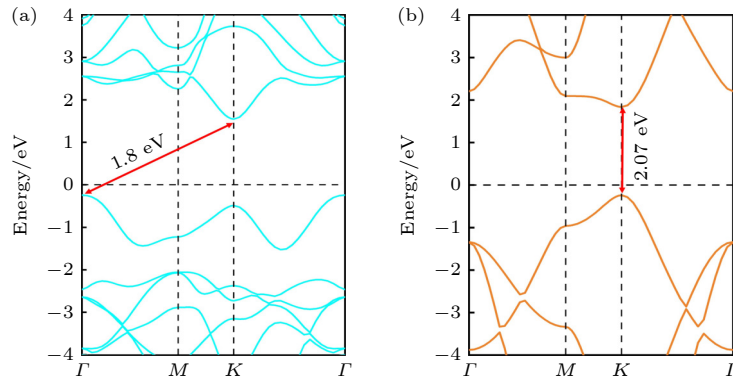


图 2 各单层材料的能带结构 (a) MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>; (b) GeC

Fig. 2. Band structure of each monolayer material: (a) MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>; (b) GeC.

3.265 Å, Ge—C, Mo—N 和两种不同 Si—N 的键长分别为 1.883, 2.096, 1.747 和 1.755 Å, 与同行的研究结果相吻合 [18,20,29]. 各单层材料的能带结构如图 2 所示, 结果表明 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 和 GeC 的带隙值分别为 1.8 和 2.07 eV, 与同行的计算结果吻合较好 [30–32]. 其中, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 为间接带隙半导体, 从图 2(a) 可以看出, 其导带底 (conduction band minimum, CBM) 和价带顶 (valence band maximum, VBM) 分别处于布里渊区的不同位置, VBM 对应

高对称点  $\Gamma$ , CBM 对应高对称点  $K$ . GeC 为直接带隙半导体, 从图 2(b) 可以看出其 CBM 和 VBM 都对应高对称点  $K$ .

为了获得 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 和 GeC 单层之间的最佳晶格失配率, 对二者分别采用  $2 \times 2 \times 1$  和  $\sqrt{3} \times \sqrt{3} \times 1$  的超胞模型来建立 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结. MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 和 GeC 的晶格常数分别为 5.821 和 5.655 Å, 晶格失配率仅为 3%. 如图 3(a) 所示, 将 GeC 层放置在 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 层上建立 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC

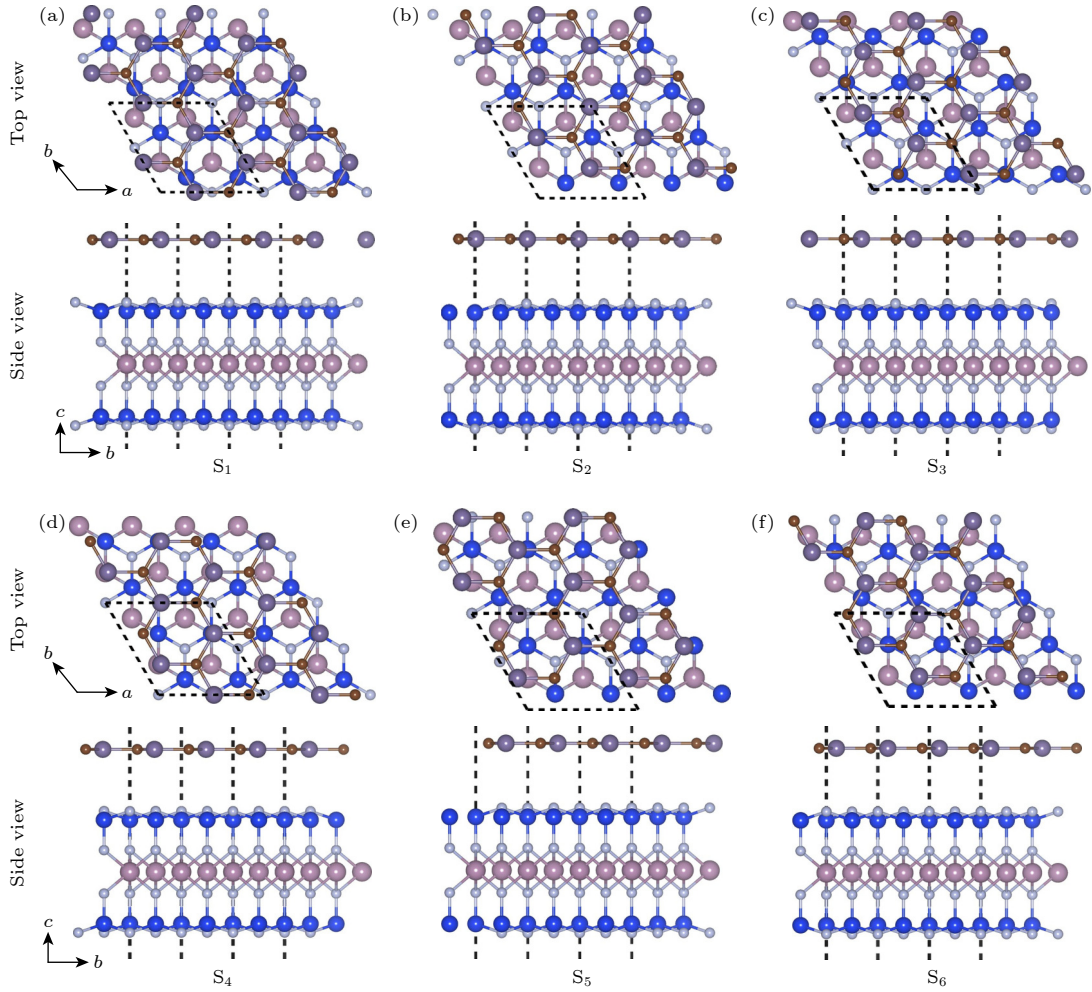

 图 3 不同堆垛方式的  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结模型

 Fig. 3.  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs heterostructure model with different stacking methods.

vdWs 异质结, 构建的  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结单元包括 34 个原子: 4 个 Mo 原子、8 个 Si 原子, 16 个 N 原子, 3 个 Ge 原子和 3 个 C 原子. 为了获得最佳堆垛方式, 构建了  $S_1$ — $S_6$  六种不同的异质结堆垛模型. 其中,  $S_1$  模型如图 3(a) 所示, 上层的 Ge—C 键对应下层的 Mo 原子. 通过将  $S_1$  模型中 GeC 层进行右上方平移得到模型  $S_2$ , 使得上层的 Ge 原子对应下层 Si 原子. 再将  $S_2$  模型中 GeC 层进行左上方平移得到模型  $S_3$ , 使得上层的 C 原子对应下层的 Mo 原子.  $S_5$  和  $S_6$  模型分别为在  $S_4$  模型基础上通过左右平移 GeC 层而得到. 结合图 3(d)—(f) 可以看出,  $S_4$  模型中的 GeC 层水平向左平移后得到  $S_5$  模型, 下层的 Mo 原子由对应上层的 Ge 原子转变为对应 Ge—C 键.  $S_4$  模型中的 GeC 层水平向右平移后得到  $S_6$  模型, 上层的 Ge 原子对应下层的 Si—N 键. 值得一提的是, 虽然  $S_5$  模型与  $S_1$  模型中上层的 Ge—C 键都对应下层的 Mo 原子, 但二者不同之处在于下层 Si—N 键对应

上层结构中不同的位置. 为了检验 6 种不同堆垛方式的  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结模型的稳定性, 进一步计算出了各个异质结模型的形成能:

$$E_{\text{form}} = E_{\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}} - E_{\text{MoSi}_2\text{N}_4} - E_{\text{GeC}}, \quad (1)$$

式中,  $E_{\text{form}}$  表示形成能,  $E_{\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}}$ ,  $E_{\text{MoSi}_2\text{N}_4}$ ,  $E_{\text{GeC}}$  分别为  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结、 $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  和 GeC 超胞的总能量.  $S_1$ — $S_6$  异质结模型的形成能分别为  $-479.59$ ,  $-479.60$ ,  $-479.76$ ,  $-480.87$ ,  $-478.90$  和  $-480.82$  meV. 其中,  $S_4$  模型的形成能最低, 其结构最稳定. 为了方便计算, 因此后续所有的电子及光学特性计算均采用稳定性最高的  $S_4$  异质结模型.

从图 4 可以看出, 对  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  和 GeC 采用超胞模型构建  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结后,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  的 CBM 处在  $K$  点, 而由于能带反折叠现象, GeC 的 VBM 变成了  $\Gamma$  点. 计算出的异质结带隙值 1.25 eV, 为间隙带隙半导体. 如图 4(b) 和图 4(c)

所示, 为了进一步明析 CBM 和 VBM 的变化机理, 计算了异质结的局域电荷密度. CBM 处的电子云集中在 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 层, VBM 处的电子云集中在 GeC 层, 表明 CBM 是由 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 贡献, 而 VBM 是由 GeC 贡献, 这是典型的 II 型能带结构. II 型异质结能促进光生载流子在空间的有效分离, 在光催化水分解领域中表现出极大的优势<sup>[33]</sup>.

为进一步描述电荷转移机制以及 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 与 GeC 之间的层间相互作用, 计算 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结沿 Z 轴方向的静电势和平均平面电荷密度. 静电势如图 5(a) 所示, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 因其结构对称性, 使得静电势也呈现出左右对称. MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 层的电势低于 GeC 层, 两层之间形成了 12.03 eV 的电势差, 电子更容易从 GeC 层流向 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 层. 相对地, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 和 GeC 的功函数分别为 5.20 和 4.63 eV. 由于 GeC 的功函数小于 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>, GeC 层比 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 层更容易失去电子, 因此当堆垛形成

异质结后, 电子更容易从 GeC 层运动到 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 层, 空穴则留在 GeC 层, 从而导致 GeC 带正电, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 带负电. 因此, 在异质界面处产生一个从 GeC 层指向 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 层的内建电场.

平均平面电荷密度如图 5(b) 所示, 当 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 和 GeC 相互接触形成异质结时, 它们之间的功函数差异将导致异质界面的电荷重新进行分布. 如图 5 插图所示, 形成平均平面电荷密度图中红色区域的电荷积累区和黄色区域的电荷消耗区. 从图 5 可以看出, 电荷积累主要集中在 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 一侧, 而电荷消耗主要集中在 GeC 一侧, 这表明 GeC 是电子供体, 而 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 是电子受体, 这与上述能带结构及静电势分析结果一致. 此外, 为了定量描述电荷的转移数量, 对 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结界面进行 Bader 电荷<sup>[34]</sup>分析. 计算表明有 0.03 |e| 的电子从 GeC 层转移至 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 层. 需强调的是, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结界面中存在的内建电

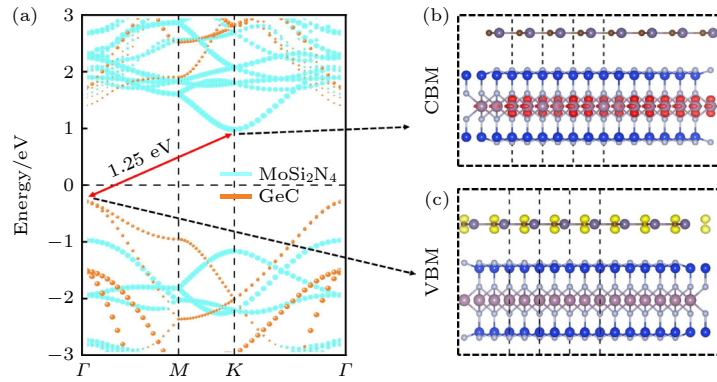


图 4 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结的电子特性 (a) 能带结构; (b) CBM 的局域电荷密度; (c) VBM 的局域电荷密度

Fig. 4. Electronic properties of MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs heterostructure: (a) Band structure; (b) local charge density of CBM; (c) local charge density of VBM.

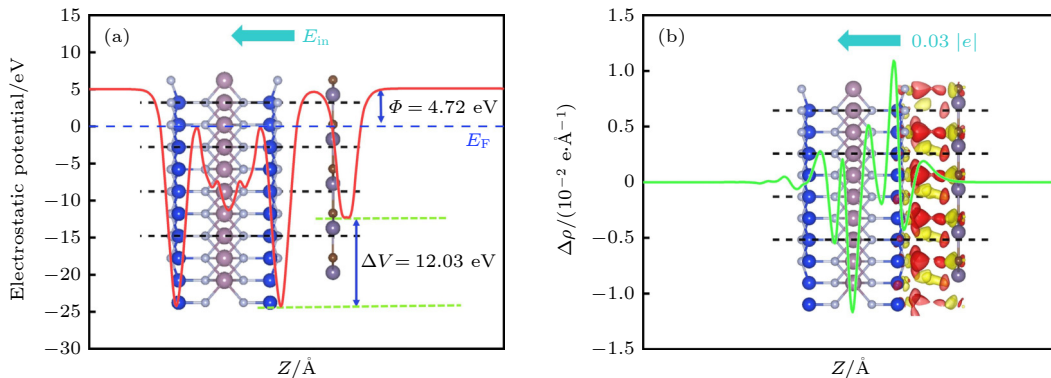


图 5 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结沿 Z 方向的电子特性 (a) 静电势图 (蓝色虚线表示费米能级); (b) 平均平面电荷密度图 (插图是差分电荷密度图, 红色和黄色分别代表电荷的积累和消耗)

Fig. 5. Electronic properties of MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs heterostructure along Z direction: (a) Electrostatic potential diagram (Blue dotted line indicates Fermi energy level); (b) average plane charge density diagram (Inset is a differential charge density plot with red and yellow representing charge accumulation and consumption, respectively).

场能显著提高载流子迁移率和载流子寿命, 并且可有效防止光生电子/空穴 ( $e^-/h^+$ ) 重组 [35]. 因此, 结合对异质结的能带结构、功函数、静电势和平均平面电荷密度的综合分析, 可知  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结电荷转移的机理符合 S 型异质结 [36–38] 机理.

### 3.2 $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$ vdWs 异质结的光学特性

S 型  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结光生载流子的转移机制, 如图 6 所示. 当可见光照射后,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  和 GeC 层的电子受到光激发从 VB 跃迁到 CB. 内建电场的存在会促进 GeC 层 VB 上的空穴和  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  层 CB 上的电子产生复合. 最终, 导致 GeC 层 CB 处留下更高还原电位的电子,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  层 VB 处留下更高氧化电位的空穴, 从而相较于 II 型异质结显著提高了氧化还原反应电位, 同时使得  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  层作为电解水的阳极发生氧化反应, 而 GeC 层作为电解水的阴极发生还原反应. S 型异质结实现在强氧化还原能力下的电子和空穴在空间上分离的同时, 能促使弱还原能力的电子和弱氧化能力的空穴重新组合, 保留了还原能力较强的电子和氧化能力较强的空穴分别参与还原反应和氧化反应 [39,40]. 避免了传统 II 型异质结中因达到电子和空穴的分离而牺牲强氧化还原电位的影响. 因此, S 型  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结有利于光催化反应的发生, 这一发现将为研究人员制备出更高效的光催化材料提供有力支撑.

光与物质相互作用的研究是深入分析半导体光学性质的重要手段 [41,42], 因此进一步研究了  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$ , GeC 和  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结的光吸收性能. 由于 GeC 的带隙较宽, 导致其对可见光的吸收率较低.  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  的带隙值小于 GeC, 故  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  的光吸收性能强于 GeC. 图 7(a) 可见光区域表明, 在紫外光范围内,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  和 GeC 分别在波长 143.89 和 119.11 nm 处的吸收峰为  $1.025 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$  和  $0.741 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ . 形成  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结后, 光吸收谱整体出现轻微红移, 并且在 266–390 nm 紫外区的吸收强度较两种单层材料得到提高, 可以进一步通过增大异质结材料的光捕获面积或缩小载流子的扩散距离等来增强其对可见光的吸收.

为了研究 S 型  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结在不同酸碱度环境下的光催化能力, 分别计算了  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$ , GeC 和 S 型  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结在不同 pH 下的氧化还原电位, 结果如图 7(b) 所示.

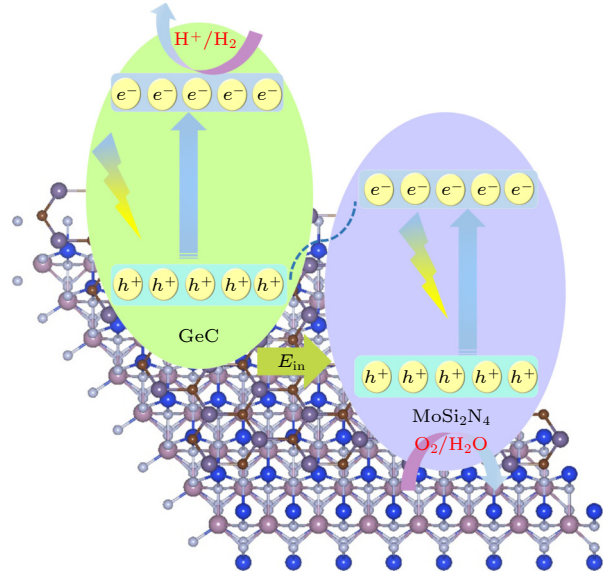


图 6 S 型  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结光生载流子的转移机制

Fig. 6. Transfer mechanism of S-type  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs heterostructure photogenerated carriers.

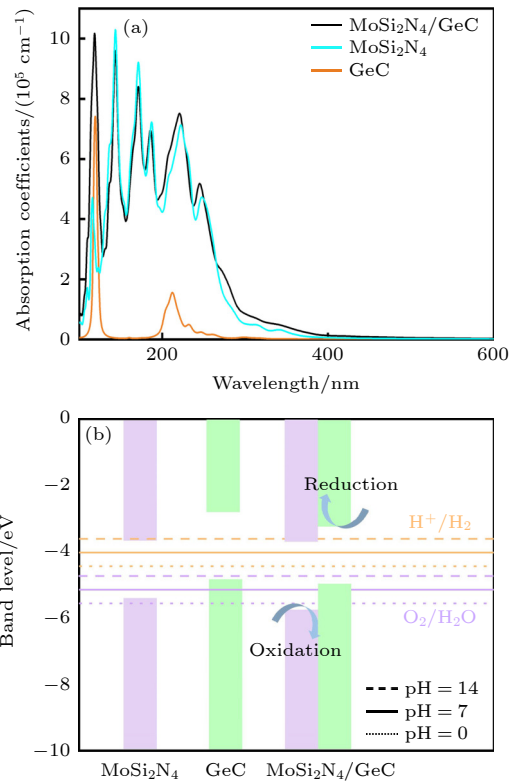


图 7  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$ , GeC 和 S 型  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结的光学特性 (a) 光吸收图谱; (b) 在不同 pH 环境下的氧化还原电位

Fig. 7. Photocatalytic performance of  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$ , GeC and  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs heterostructure: (a) Optical absorption spectra; (b) redox potential under different pH environments.

从图 7 可以看出,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  的氧化还原电位均低于  $\text{GeC}$ . 当  $\text{pH} = 0, 7$  和  $14$  时, 水的氧化电位分别为  $-5.56, -5.18$  和  $-4.73$  eV, 水的还原电位分别为  $-4.44, -4.03$  和  $-3.62$  eV. 为了满足光催化水分解的要求, 光催化剂的 CBM 电位应高于标准氢电位, VBM 电位应低于标准氧电位 [43].  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  和  $\text{GeC}$  的 CBM 电位分别为  $-3.62$  和  $-2.78$  eV, VBM 电位分别为  $-5.41$  和  $-4.85$  eV. 当  $\text{pH} = 7$  时,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  的 CBM 和 VBM 分别处于  $\text{H}^+/\text{H}_2$  和  $\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$  的上方和下方, 表明其可以满足室温条件下  $\text{pH} = 7$  的光催化水分解要求. 当  $\text{pH} = 14$  时,  $\text{GeC}$  的 CBM 和 VBM 跨越氧化还原电位, 可以在部分碱性范围的环境下工作. 而  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结由于 S 型构型的特殊性, 其氧化还原电位被抬高, 使得其实际发生氧化和还原反应的位置分别为  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  的 VBM 处和  $\text{GeC}$  的 CBM 处,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  的 VBM 和  $\text{GeC}$  的 CBM 电位分别为  $-5.79$  和  $-3.21$  eV, 低于 (高于)  $\text{pH} = 0-14$  时的标准氧电位 (标准氢电位), 满足光催化水分解氧化还原电位的要求, 并且相较于两种单层材料大幅拓宽了光催化水分解的  $\text{pH}$  适用范围. 综上, S 型  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结因其优异的光催化水分解性能可以作为一种高效的光催化材料.

### 3.3 $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$ vdWs 异质结在双轴应变和垂直电场下的电子及光学特性

施加双轴应变 [23,44] 和垂直电场 [45,46] 是调节异质结电子及光学特性的有效方法. 首先, 对  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结施加  $-8\%-8\%$  双轴应变, 水平

应变梯度为 2%. 图 8(a) 为不同双轴应变下  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结的带隙变化, 负号表示施加压缩应变, 正号表示施加拉伸应变. 当施加压缩应变时, 带隙随应变的增加而先增大再减小, 当施加拉伸应变时, 带隙随应变的增大而减小. 此外, 在  $-8\%-8\%$  应变范围内, 带隙范围从  $0-1.47$  eV, 特别是当施加的拉伸应力从 4% 增至 6% 时, 带隙的变化较为明显, 从 0.80 eV 减小至 0.26 eV.

施加的应变不同, 其 CBM 和 VBM 在异质结能带结构中的位置也将发生变化, 各应变下的能带结构如图 9 所示. 当施加压缩应变时, CBM 由  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  材料贡献, 而 VBM 由  $\text{GeC}$  材料贡献, 且 CBM 和 VBM 分别对应不同的高对称点, 故施加压缩应变时,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结皆表现为间接带隙半导体和 II 型能带结构. 当施加 2% 和 4% 的拉伸应变时,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结同样表现为间接带隙半导体和 II 型能带结构. 如图 9(g) 所示, 当拉伸应变大于 6% 时,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结表现为直接带隙半导体, 能带结构类型转变为 I 型, 其 CBM 与 VBM 均由  $\text{GeC}$  贡献, 且分别对应同一个高对称点  $\Gamma$ . 值得注意的是, 图 9(h) 中当拉伸应变为 8% 时,  $\text{GeC}$  的能带穿透了费米能级, 异质结从半导体转变为金属. 这表明在这些应变条件下有利于制备出高效的  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结光催化剂. 整体来看,  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结随着拉伸应变的增大, CBM 和 VBM 的均趋向费米能级移动; 随着压缩应变的增大, CBM 表现为远离费米能级, VBM 则靠近费米能级, 但 CBM 和 VBM 的位置没有发生改变.

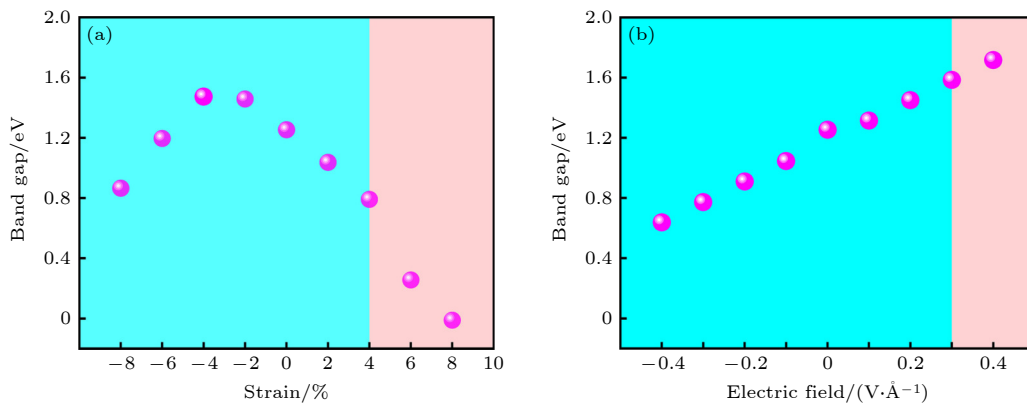


图 8  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs 异质结在不同双轴应变 (a) 和垂直电场 (b) 下的带隙变化

Fig. 8. Band gap change of  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$  vdWs heterostructure are applied with different biaxial strains (a) and vertical electric field (b).

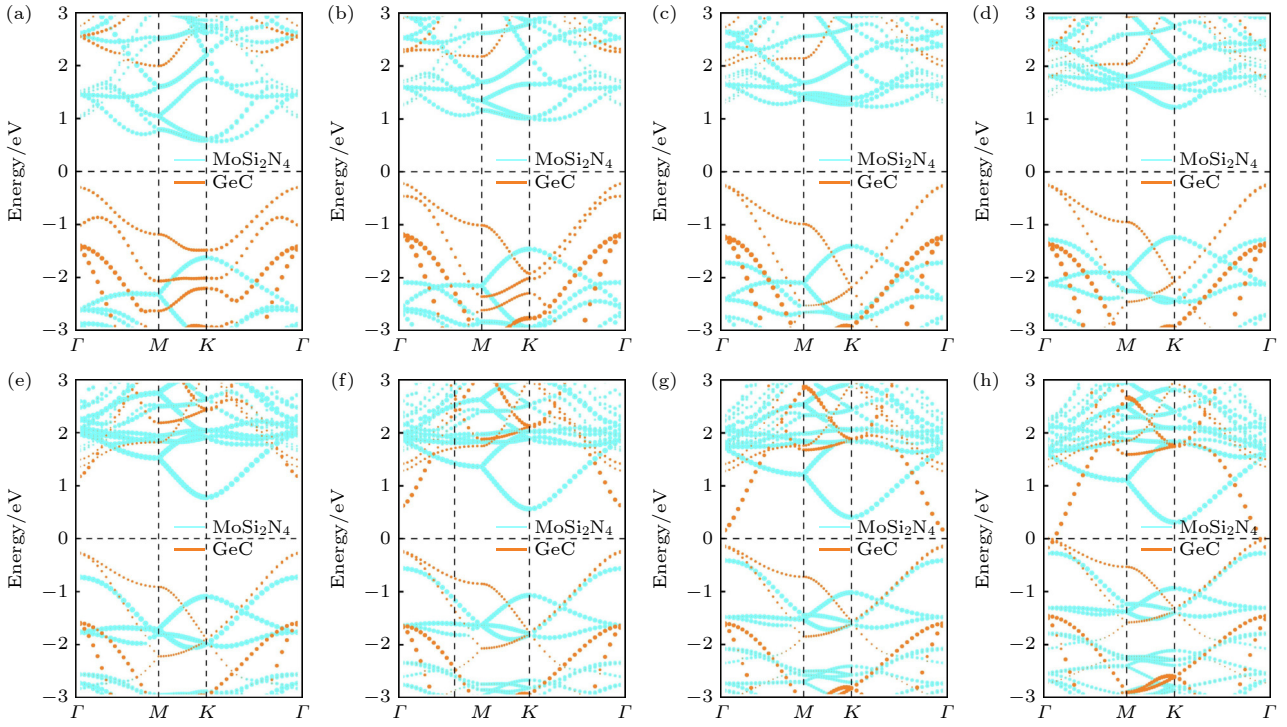


图9 不同双轴应变下 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结的能带结构 (a)  $\varepsilon = -8\%$ ; (b)  $\varepsilon = -6\%$ ; (c)  $\varepsilon = -4\%$ ; (d)  $\varepsilon = -2\%$ ; (e)  $\varepsilon = 2\%$ ; (f)  $\varepsilon = 4\%$ ; (g)  $\varepsilon = 6\%$ ; (h)  $\varepsilon = 8\%$

Fig. 9. Band structures of MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs heterostructure under different biaxial strains: (a)  $\varepsilon = -8\%$ ; (b)  $\varepsilon = -6\%$ ; (c)  $\varepsilon = -4\%$ ; (d)  $\varepsilon = -2\%$ ; (e)  $\varepsilon = 2\%$ ; (f)  $\varepsilon = 4\%$ ; (g)  $\varepsilon = 6\%$ ; (h)  $\varepsilon = 8\%$ .

沿 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结的 Z 方向施加  $-0.4-0.4 \text{ V/\AA}$  的垂直电场, 带隙变化如图 8(b) 所示. 当施加负电场时, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结的带隙随电场强度的增大均有不同程度的减小. 当施加正电场时, 带隙随正电场的增大而逐渐增大. 因此, 施加的电场为正或负, 带隙均呈现出近似线性变化, 整体带隙变化范围为  $0.77-1.72 \text{ eV}$ .

图 10 为不同电场下 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结的能带结构. 随着负电场的增大, CBM 均趋向费米能级向下移动, VBM 均趋向费米能级向上移动, 异质结均表现为间接带隙半导体和 II 型能带结构. 随着正电场的增大, CBM 均远离费米能级向上移动, VBM 均趋向费米能级向上移动. 值得注意的是, 当施加  $0.4 \text{ V/\AA}$  的电场时, 异质结仍表现为间接带隙半导体, 但能带类型从 II 型转变为 I 型. 综合不同垂直电场下 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结的带隙变化可以得出, 施加  $-0.4-0.1 \text{ V/\AA}$  的负电场能有效调控 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结, 保持 II 型能带结构和减小带隙, 从而有利于提高电子跃迁能力和改善光催化性能.

最后, 计算了 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结在

不同双轴应变和垂直电场下的光吸收性能. 从图 11(a) 可以看出, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结在  $-8\%-8\%$  应变下, 在可见光区域的光吸收效果较弱, 但在紫外光区域的光吸收效果显著. 当施加压缩应变时, 异质结对紫外光的吸收增强, 但对可见光的吸收减弱. 在紫外区域的光吸收性能表现为随着压缩应变的增加而增强, 尤其在  $-8\%$  和  $-6\%$  应变下, 异质结在紫外区域的光吸收能力最强, 吸收峰分别为  $1.154 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  和  $1.137 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ , 波长分别对应  $230.21 \text{ nm}$  和  $222.67 \text{ nm}$ .

对比未施加应变时的异质结, 施加压缩应变会显著增加对紫外光的吸收能力. 当施加拉伸应变时, 异质结对可见光的吸收能力较压缩应变时提高, 尤其在拉伸应变为  $6\%$  和  $8\%$  时, 对可见光的吸收效果较其他应变下吸收效果更明显. 图 11(b) 为 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结在不同垂直电场下的光吸收图谱, 与不同双轴应变下 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结的光吸收性能相比, 当施加垂直电场时, 可见光和近紫外光区域的光吸收性能较弱. 综上, 紫外区域强的光吸收能力使 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结在紫外光电器件领域具有广泛的应用前景.

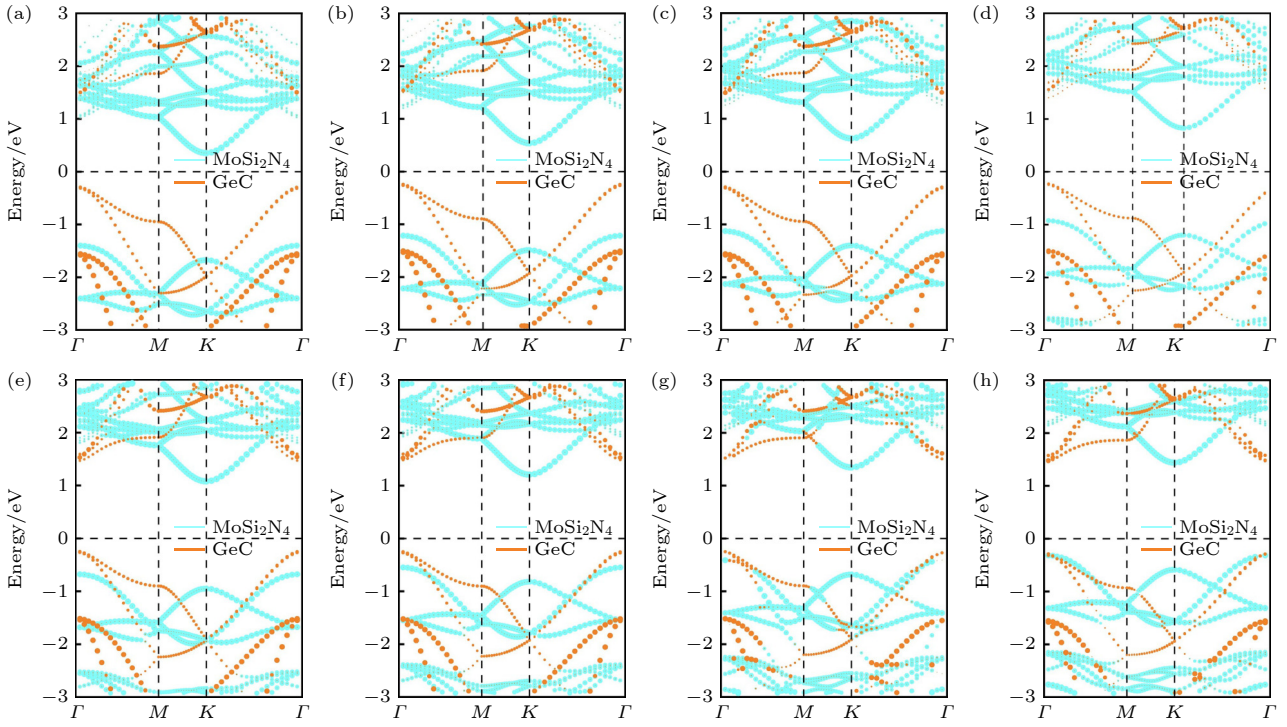


图 10 不同电场下 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结的能带结构 (a)  $E = -0.4 \text{ V/Å}$ ; (b)  $E = -0.3 \text{ V/Å}$ ; (c)  $E = -0.2 \text{ V/Å}$ ; (d)  $E = -0.1 \text{ V/Å}$ ; (e)  $E = 0.1 \text{ V/Å}$ ; (f)  $E = 0.2 \text{ V/Å}$ ; (g)  $E = 0.3 \text{ V/Å}$ ; (h)  $E = 0.4 \text{ V/Å}$   
 Fig. 10. Band structure of MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs heterostructures under different field: (a)  $E = -0.4 \text{ V/Å}$ ; (b)  $E = -0.3 \text{ V/Å}$ ; (c)  $E = -0.2 \text{ V/Å}$ ; (d)  $E = -0.1 \text{ V/Å}$ ; (e)  $E = 0.1 \text{ V/Å}$ ; (f)  $E = 0.2 \text{ V/Å}$ ; (g)  $E = 0.3 \text{ V/Å}$ ; (h)  $E = 0.4 \text{ V/Å}$ .

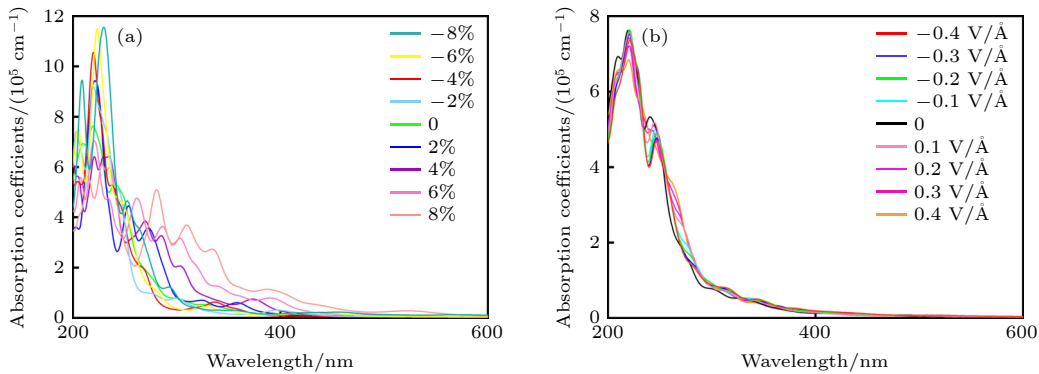


图 11 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结在不同双轴应变 (a) 和垂直电场 (b) 下的光吸收图谱

Fig. 11. Optical absorption spectra of MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs heterostructure under different biaxial strains (a) and vertical electric fields (b).

## 4 结 论

采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法构建了 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs S 型异质结, 对其进行电子及光学特性计算, 并探究施加双轴应变和垂直电场对异质结能带结构和光吸收特性的影响。

1) 电子特性计算表明, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结是一种带隙为 1.25 eV 的间接带隙半导体, 具有由 GeC 层指向 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 的内建电场。Bader

电荷分析表明有 0.03  $|e|$  的电子从 GeC 层转移至 MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> 层。

2) 光学特性计算表明, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结光生载流子转移机制符合 S 型异质结机理, 在保证光生电子-空穴对有效分离的基础上, 还保留了较强的氧化还原能力, 有效提高了异质结光催化水分解的氧化还原电位。其较强的氧化还原电位满足  $\text{pH} = 0\text{--}14$  范围内的光催化水分解氧化还原电位的要求。此外, 其在 266—390 nm 紫外区的吸收强度较两种单层材料得到提高。

3) 双轴应变计算表明, 在大于 6% 应变条件下, 异质结能带类型从 II 型转变为 I 型. 带隙随压缩应变的增大而先增大再减小, 并且在压缩应变下异质结在紫外区域的光吸收性能随应变的增大而增强, 特别是-8% 和-6% 应变条件下, 在紫外区域的吸收能力最强. 带隙随拉伸应变的增大而减小, 在拉伸应变下, 异质结对可见光的吸收能力较压缩应变时强.

4) 垂直电场计算表明, 在 0.4 V/Å 电场条件下, 异质结能带类型从 II 型转变为 I 型. 带隙随正和负电场的增大均呈现出近似线性变化, 表现为随正电场的增大而增大, 随负电场的增大而减小.

综上所述, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC vdWs 异质结因其具有稳定的结构、合适的带隙、较强的氧化还原电位和较高的光生载流子迁移率等性能, 在光电器件和光催化等领域具有潜在的应用前景, 其可以作为一种高效的光催化材料应用于制备太阳能电池等光学器件.

## 参考文献

- Xiong Z Q, Zhang P C, Kang W B, Fang W Y 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 166301 (in Chinese) [熊子谦, 张鹏程, 康文斌, 方文玉 2020 物理学报 **69** 166301]
- Cai X F, Huang Y W, Hu J Z, Zhu S W, Tian X H, Zhang K, Ji G J, Zhang Y X, Fu Z D, Tan C L 2020 *J. Catal.* **10** 1208
- Yang K, Huang W Q, Xu L, Luo W K, Yang Y C, Huang G F 2016 *Mater. Sci. Semicond. Process.* **41** 200
- Sun Z Y, Xu J, Nsajigwa M, Yang W X, Wu X W, Yi Z, Chen S J, Zhang W B 2022 *Commun. Theor. Phys.* **74** 015503
- Bohayra M, Brahmanandam J, Fazel S, Rabczuk T, Shapeev A V, Zhuang X Y 2021 *Nano Energy* **82** 105716
- Hong Y L, Liu Z B, Wang L, Zhou T Y, Ma W, Xu C, Feng S, Chen L, Chen M L, Sun M D, Chen X Q, Cheng M H, Ren W C 2020 *Science* **369** 670
- Cao L M, Zhou G H, Wang Q Q, Ang L K, Ang Y S 2021 *Appl. Phys. Lett.* **8** 013106
- Li Y H, Ho W K, Lü K L, Zhu B C, Li C S 2018 *Appl. Surf. Sci.* **430** 380
- Zhu Z, Tang X, Wang T, Fan W Q, Liu Z, Li C X, Huo P W, Yan Y S 2018 *Appl. Catal. B* **241** 319
- Li S J, Li Y Y, Shao L X, Wang C D 2021 *Chemistry Select* **6** 181
- Chen H, Li Y, Huang L, Li J B 2015 *J. Phys. Chem. C* **119** 29148
- King'ori G W, Ouma C N M, Mishra A K, Amolo G O, Makau N W T 2020 *RSC Adv.* **10** 30127
- Chen Y C, Tang Z Y, Shan H L, Jiang B, Ding Y L, Luo X, Zheng Y 2021 *Phys. Rev. B* **104** 075449
- Zhang X, Chen A, Zhang Z H, Jiao M G, Zhou Z 2019 *Nanoscale Adv.* **1** 154
- He Y, Zhang M, Shi J J, Cen Y L, Wu M 2019 *J. Phys. Chem. C* **123** 12781
- Zhang K A, Zhang T N, Cheng G H, Li T X, Wang S X, Wei W, Zhou X H, Yu W W, Sun Y, Wang P, Zhang D, Zeng C G, Wang X J, Hu W D, Fan H J, Shen G Z, Chen X, Duan X F, Chang K, Dai N 2016 *ACS Nano* **10** 3852
- Jacobs D A, Langenhorst M, Sahli F, Richards B S, Paetzold U W 2019 *J. Phys. Chem. Lett.* **10** 3159
- He C, Zhang J H, Zhang W X, Li T T 2019 *J. Phys. Chem. Lett.* **10** 3122
- Fang L, Ni Y, Hu J S, Tong Z F, Ma X G, Lü H, Hou S C 2022 *Phys. E* **143** 115321
- Liu C Y, Wang Z W, Xiong W Q, Zhong H X, Yuan S J 2022 *J. App. Phys.* **131** 163102
- Luo C, Long Q, Cheng B, Zhu B C, Wang L X 2023 *Acta Phys. Chim. Sin.* **39** 2212026 (in Chinese) [罗铖, 龙庆, 程蓓, 朱必成, 王临曦 2023 物理化学学报 **39** 2212026]
- Mei Z H, Wang G H, Yan S J, Wang J 2021 *Acta Phys. Chim. Sin.* **37** 2009097 (in Chinese) [梅子慧, 王国宏, 严素定, 王娟 2021 物理化学学报 **37** 2009097]
- Dhakal K P, Roy S, Jang H, Chen X, Yun W S, Kim H, Lee J, Kim J, Ahn J H 2017 *Chem. Mater.* **29** 5124
- Ji Y J, Dong H L, Hou T J, Li Y Y 2018 *J. Mater. Chem. A* **6** 2212
- Fan X P, Jiang J W, Li R, Guo L, Mi W B 2022 *Chem. Phys. Lett.* **805** 139968
- Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comp. Mat. Sci.* **54** 11169
- Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- Shi J Y, Ou Y, Max A M, Wang H Y, Li H, Zhang Y, Gu Y S, Zou M Q 2019 *Comput. Mater. Sci.* **160** 301
- Guo R, Luan L J, Cao M Y, Zhang Y, Wei X, Fan J B, Ni L, Liu C, Yang Y, Liu J, Tian Y, Duan L 2023 *Phys. E* **149** 115628
- Li R X, Tian X L, Zhu S C, Mao Q H, Ding J, Li H D 2022 *Phys. E* **144** 115443
- Yang F, Zhuo Z G, Han J N, Cao X C, Tao Y, Zhang L, Liu W J, Zhu Z Y, Dai Y H 2021 *Superlattice. Microst.* **156** 106935
- Zhao T T, Yao M, Wang X D 2023 *Mater. Res. Appl.* **17** 205 (in Chinese) [赵婷婷, 姚曼, 王旭东 2023 材料研究与应用 **17** 205]
- Bader R F W 1991 *Chem. Rev.* **91** 893
- Luan L J, He Y, Wang T, Liu Z W 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 166302 (in Chinese) [栾丽君, 何易, 王涛, 刘 Z W 2021 物理学报 **70** 166302]
- Wang J Q, Cheng H, Wei D Q, Li Z H 2022 *Chin. J. Cat.* **43** 2606
- Zhu Y K, Zhuang Y, Wang L L, Tang H, Meng X F, She X L 2022 *Chin. J. Cat.* **43** 2558
- Zhao Z L, B J, Zhao L N, Wu H J, Xu S, Sun L, Li Z J, Zhang Z Q, Jing L Q 2022 *Chin. J. Cat.* **43** 1331
- Wang J, Wang G H, Cheng B, Yu J G, Fan J J 2021 *Chin. J. Catal.* **42** 56
- Luo J H, Lin Z X, Zhao Y, Jiang S J, Song S Q 2020 *Chin. J. Catal.* **41** 130
- Ye J X, Liu J W, An Y K 2020 *Appl. Surf. Sci.* **501** 144262
- Liu C X, Pang G W, Pan D Q, Shi L Q, Zhang L L, Lei B C, Zhao X C, Huang Y N 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 097301 (in Chinese) [刘晨曦, 庞国旺, 潘多桥, 史蕾倩, 张丽丽, 雷博程, 赵旭才, 黄以能 2022 物理学报 **71** 097301]
- Navarro Yerga Rufino M, Alvarez Galván M Consuelo, del Valle F, Villoria de la Mano José A, Fierro José L G 2009 *Chem. Sus. Chem.* **2** 471
- Wang Z, Zhang Y, Wei X, Guo T T, Fan J B, Ni L, Weng Y

J, Zha Z D, Liu J, Tian Y, Li T, Duan L 2020 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22** 9630  
[45] Li X R, Dai Y, Ma Y D, Han S H, Huang B B 2014 *Phys.*

*Chem.* **16** 4230  
[46] Bai K F, Cui Z, Li E L, Ding Y C, Zheng J S, Liu C, Zheng Y P 2020 *Vacuum* **180** 109562

# First principles study of electronic and optical properties of S-type heterostructures MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC\*

Zhao Na-Na<sup>1)2)†</sup> Wang Jia-Min<sup>1)2)</sup> Yuan Zhi-Hao<sup>3)</sup>  
Cui Zhen<sup>4)</sup> Ren Cong-Cong<sup>1)2)</sup>

1) (*School of Materials Science and Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China*)

2) (*International Joint Research Center for Intelligent Manufacturing Technology of Composite Materials and Products, Xi'an 710048, China*)

3) (*School of Science, Xi'an University of Technology, Xi'an 710054, China*)

4) (*School of Automation and Information Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China*)

( Received 23 May 2023; revised manuscript received 18 August 2023 )

## Abstract

In this article, the first principles calculation method is used to study the MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC heterostructures, and calculate its structural, electronic, and optical properties. And the effects of different biaxial strains and vertical electric fields on the band structure and optical absorption characteristics of the heterostructures are also investigated. MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC heterostructure is an indirect bandgap semiconductor with a bandgap of 1.25 eV, with the built-in electric field direction pointing from the GeC layer to the MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> layer. In addition, its photogenerated carrier transfer mechanism conforms to the S-type heterostructures mechanism, thus improving the oxidation reduction potential of photocatalytic water decomposition, making it fully meet the requirements of photocatalytic water decomposition with pH = 0–14. Under biaxial strain, the band gap first increases and then decreases with the increase of compressive strain, and the light absorption performance in the ultraviolet region increases with compressive strain increasing. The band gap decreases as tensile strain increases, and the light absorption performance in the visible light region is enhanced in comparison with its counterpart under compressive strain. Under a vertical electric field, the band gap increases with positive electric field increasing, and decreases with negative electric field increasing. In summary, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>/GeC heterostructures can be used as an efficient photocatalytic material in some fields such as optoelectronic devices and photocatalysis.

**Keywords:** S-type heterostructures, photocatalytic water decomposition, biaxial strain regulation, vertical electric field regulation

**PACS:** 61.82.Fk, 31.15.es, 36.20.Kd

**DOI:** [10.7498/aps.72.20230836](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230836)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 52274395, U20A20235), the Key Research and Development Program of Shaanxi Province, China (Grant No. 2018ZDXM-GY-139), and the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 2018M633542).

† Corresponding author. E-mail: [zhaonasaam2007@163.com](mailto:zhaonasaam2007@163.com)



S型异质结 $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$ 电子及光学特性的第一性原理研究

赵娜娜 王佳敏 袁志浩 崔真 任聪聪

First principles study of electronic and optical properties of S-type heterostructures  $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{GeC}$

Zhao Na-Na Wang Jia-Min Yuan Zhi-Hao Cui Zhen Ren Cong-Cong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 196102 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230836

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230836>

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

电场对 $\text{GaN}/g\text{-C}_3\text{N}_4$ 异质结电子结构和光学性质影响的第一性原理研究

First-principles study of influence of electric field on electronic structure and optical properties of  $\text{GaN}/g\text{-C}_3\text{N}_4$  heterojunction

物理学报. 2022, 71(9): 097301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212261>

外电场和双轴应变对 $\text{MoSH}/\text{WSi}_2\text{N}_4$ 肖特基结势垒的调控

Modulation of  $\text{MoSH}/\text{WSi}_2\text{N}_4$  Schottky-junction barrier by external electric field and biaxial strain

物理学报. 2022, 71(21): 217301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220882>

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

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

物理学报. 2021, 70(6): 067101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201728>

应变诱导单层 $\text{NbSi}_2\text{N}_4$ 材料磁转变的第一性原理研究

First principles study of magnetic transition of strain induced monolayer  $\text{NbSi}_2\text{N}_4$

物理学报. 2022, 71(20): 206303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220939>

单层 $\text{CrI}_3$ 电荷输运性质和光学性质应变调控的第一性原理研究

First-principles study of strain-tunable charge carrier transport properties and optical properties of  $\text{CrI}_3$  monolayer

物理学报. 2022, 71(20): 207102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221019>

$\text{As}/\text{HfS}_2$ 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  $\text{As}/\text{HfS}_2$  van der Waals heterostructure

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