

Janus MoSSe/g-C₃N₄ 异质结的电子性质及其双轴应变调控*

胡栋 李孝宝[†] 王美芹

(合肥工业大学土木与水利工程学院, 合肥 230009)

(2025 年 8 月 27 日收到; 2025 年 9 月 28 日收到修改稿)

构建范德瓦耳斯异质结是丰富二维材料物性并增强其光电等性能的有效策略. 本文基于第一性原理模拟, 系统地研究了两种不同界面结构的 Janus MoSSe/g-C₃N₄ 异质结 (即 SMoSe/g-C₃N₄ 和 SeMoS/g-C₃N₄) 的电子性质及其双轴应变调控规律. 结果表明, 针对 SMoSe/g-C₃N₄ 异质结构, MoSSe 本征偶极场与界面电场方向一致, 相互叠加形成由 g-C₃N₄ 指向 MoSSe 的增强电场, 体系呈现 I 型能带排列特征; 而在 SeMoS/g-C₃N₄ 异质结构中, 两者方向相反, 部分相互抵消后形成由 MoSSe 指向 g-C₃N₄ 的净电场, 呈现 II 型能带排列特征, 可促进载流子的分离从而有效提升其光催化分解水活性. 进一步研究发现, 施加双轴应变可有效地调节两种异质结构的电子能带, 尤其在 SeMoS/g-C₃N₄ 中可实现 I 型与 II 型能带结构的可逆转变. 本研究为 Janus MoSSe/g-C₃N₄ 异质结在光催化与光电器件领域的应用提供了理论依据.

关键词: 异质结, 电子结构, 应变调控, 第一性原理模拟**DOI:** 10.7498/aps.75.20251158**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251158

1 引言

自 2004 年通过微机械剥离法成功制备单层石墨烯以来^[1], 二维材料因其独特的物理性质受到学者们的广泛关注^[2]. 在众多二维材料中, 过渡金属二硫化物 (transition-metal dichalcogenides, TMDs, 化学通式为 MX_2 , $M = \text{Mo, W}$; $X = \text{S, Se, Te}$) 在基础研究和器件应用方面取得了显著进展^[3-5]. 然而, 传统二维 TMD 材料具有高度对称的晶格结构, 这在一定程度限制了对电子态和功能特性的进一步调控设计. 为此, 一类打破面外结构对称性的 Janus 二维 TMD 材料应运而生 (化学通式变为 MXY , $X \neq Y$). 例如, 通过将二维 MoS₂ 中一层 S 原子替换为 Se 原子, 可成功地制备得到以 Janus MoSSe 为名的“双面神”二维材料^[6,7]. 此类结构打

破镜面对称性, 引发面外极化响应和 Rashba 自旋劈裂等效应^[8-10], 进而赋予材料更加新颖的电子性质^[11]、力学性质^[12]、力电耦合特性^[13]和催化性能^[14], 在光电子器件、能源转换与催化等领域展示出巨大前景^[15,16].

近年来, 石墨相氮化碳 (g-C₃N₄) 作为一种新型二维非金属半导体材料, 因其独特的结构和光电性质受到广泛关注. 该材料通常通过化学气相沉积 (CVD) 或温度诱导冷凝实验合成^[17,18], 具有多孔骨架结构、高稳定性、可见光响应和可调节能带间隙等特点^[19-22]. 研究发现 g-C₃N₄ 主要存在两种典型构型, 即 tri-s-triazine 和 s-triazine 晶体结构^[23]. 迄今, 多数研究集中于 tri-s-triazine 型^[24,25], 而对 s-triazine 结构的研究却鲜有报道^[26,27], 其电子性质及调控机制尚不明确. 此外, g-C₃N₄ 仍面临可见光吸收范围较窄和载流子复合率较高等问题,

* 安徽省自然科学基金 (批准号: 2208085MA17) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: xiaobaoli@hfut.edu.cn

制约了其在光催化领域的应用^[28]. 为改善其光电性能, 研究者们已经尝试多种策略, 包括构造多孔结构、元素掺杂以及构筑异质结等^[29–31].

在已报道的多种改性策略中, 基于范德瓦耳斯 (vdW) 作用垂直堆叠不同二维材料构筑的异质结构, 因其能够整合各组分优势并诱发新奇物理现象, 已成为当前研究的热点^[32,33]. 此类结构中层内由强共价键确保了结构稳定性, 而层间则由弱 vdW 相互作用维系, 使得异质结即使在晶格失配条件下仍能实现稳定堆叠^[34]. 根据能带排列方式, vdW 异质结通常可分为 I 型、II 型和 III 型. 其中, I 型异质结有利于电子和空穴的快速复合, 适用于发光二极管等光学器件^[35]; II 型异质结可实现载流子分离并延长激子寿命, 适用于光催化和光电探测等^[36]; III 型异质结则具有能带重叠特征, 适用于隧道场效应晶体管等器件^[37,38]. 研究表明, vdW 异质结不仅能保留组分材料的本征属性, 还可通过界面耦合产生增强的光电与磁学性能. 例如, Ye 等^[39]发现 g-C₃N₄/WSe₂ 异质结在紫外光和可见光区域吸收能力显著增强, 外电场可诱导其能带排列由 I 型向 II 型转变, 双轴应变则可调控其直接-间接带隙转变并引起吸收峰的红移和蓝移. Liu 等^[40]报道的 MoSSe/WSSe 异质结在应变与电场调控下表现出更高的载流子分离效率及增强的可见光和紫外光吸收性能.

鉴于 MoSSe 和 g-C₃N₄ 之间具有较小的晶格失配度, 本文构建由单层 MoSSe 与 s-triazine 型 g-C₃N₄ 组成的范德瓦耳斯异质结, 采用基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的第一性原理计算方法, 系统研究不同堆叠构型下的界面稳定性、电子结构及能带排列方式, 重点考察应变对能带结构、态密度、电荷密度分布与转移等关键物理量的影响规律, 旨在揭示应变工程对 Janus MoSSe/g-C₃N₄ 异质结光电性能的调控机制, 为拓展此类异质结在光电器件领域的应用提供理论依据.

2 计算方法

本文所有第一性原理模拟计算均采用 VASP (Vienna *ab initio* simulation package) 模拟软件包执行^[41]. 计算中采用投影缀加波 (PAW) 方法描述原子核与价电子之间的相互作用^[42], 电子交换

关联作用采用广义梯度近似 (GGA) 下的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 方法描述^[43]. 为准确描述层间 vdW 相互作用, 引入了 DFT-D3 方法进行修正^[44]. 布里渊区取样的 k 点网格密度设置为 $6 \times 6 \times 1$. 计算中设置平面波截断势能为 400 eV, 能量和原子间作用力的收敛标准分别设置为 10^{-4} eV 和 0.01 eV/Å. 为消除由周期性边界条件引起的相邻镜像层之间的相互作用, 在垂直于异质结构平面方向设置了厚度为 20 Å 的真空层. 需要提出的是, 在计算功函数时已添加了垂直于平面方向的偶极子校正, 且以上模拟参数均经过收敛性测试后确定.

3 结果与讨论

3.1 晶体结构与电子性质

首先, 本文研究了本征单层 Janus MoSSe 与 g-C₃N₄ 的晶体结构及电子性质. 图 1(a), (b) 分别展示了两者的俯视与侧视结构示意图. Janus MoSSe 的晶格常数为 3.25 Å, 带隙为 1.63 eV, Mo—S 与 Mo—Se 键长分别为 2.42 Å 和 2.54 Å. g-C₃N₄ 的晶格常数为 4.79 Å, 带隙为 1.85 eV, 其结构中存在两种不同的 C—N 键, 键长分别为 1.33 Å 和 1.47 Å, 与 Pei^[45] 报道的数据高度一致.

Janus MoSSe/g-C₃N₄ 异质结计算超胞由 $3 \times 3\sqrt{3}$ 的 MoSSe 超胞与 $2 \times 2\sqrt{3}$ 的 g-C₃N₄ 超胞垂直堆叠构成, 二者在平面内的晶格失配率仅为 1.8%, 计算公式如下:

$$\delta = \frac{(a-b) \times 2}{(a+b)} \times 100\%, \quad (1)$$

其中, a 和 b 分别为两种材料在 x 方向上的晶格常数. 根据界面原子种类的不同, 将异质结分为两种基本构型: S-MoSe/g-C₃N₄ (记为 A 型) 与 Se-MoS/g-C₃N₄ (记为 B 型), 分别代表 Se 和 S 原子层界面. 对于每种界面构型, 将 Janus MoSSe 层相对于 g-C₃N₄ 分别顺时针旋转 0°, 60°, 120°, 180°, 240° 和 300° 共得到 12 种堆叠模式, 分别记为 A1—A6 和 B1—B6, 如图 1(c) 所示.

Janus MoSSe/g-C₃N₄ 异质结界面结合强度用黏附功评估, 黏附功越大, 界面结合强度越强, 界面越稳定, 计算公式如下:

$$W_{\text{ad}} = (E_{\text{MoSSe}} + E_{\text{g-C}_3\text{N}_4} - E_{\text{MoSSe/g-C}_3\text{N}_4}) / A, \quad (2)$$

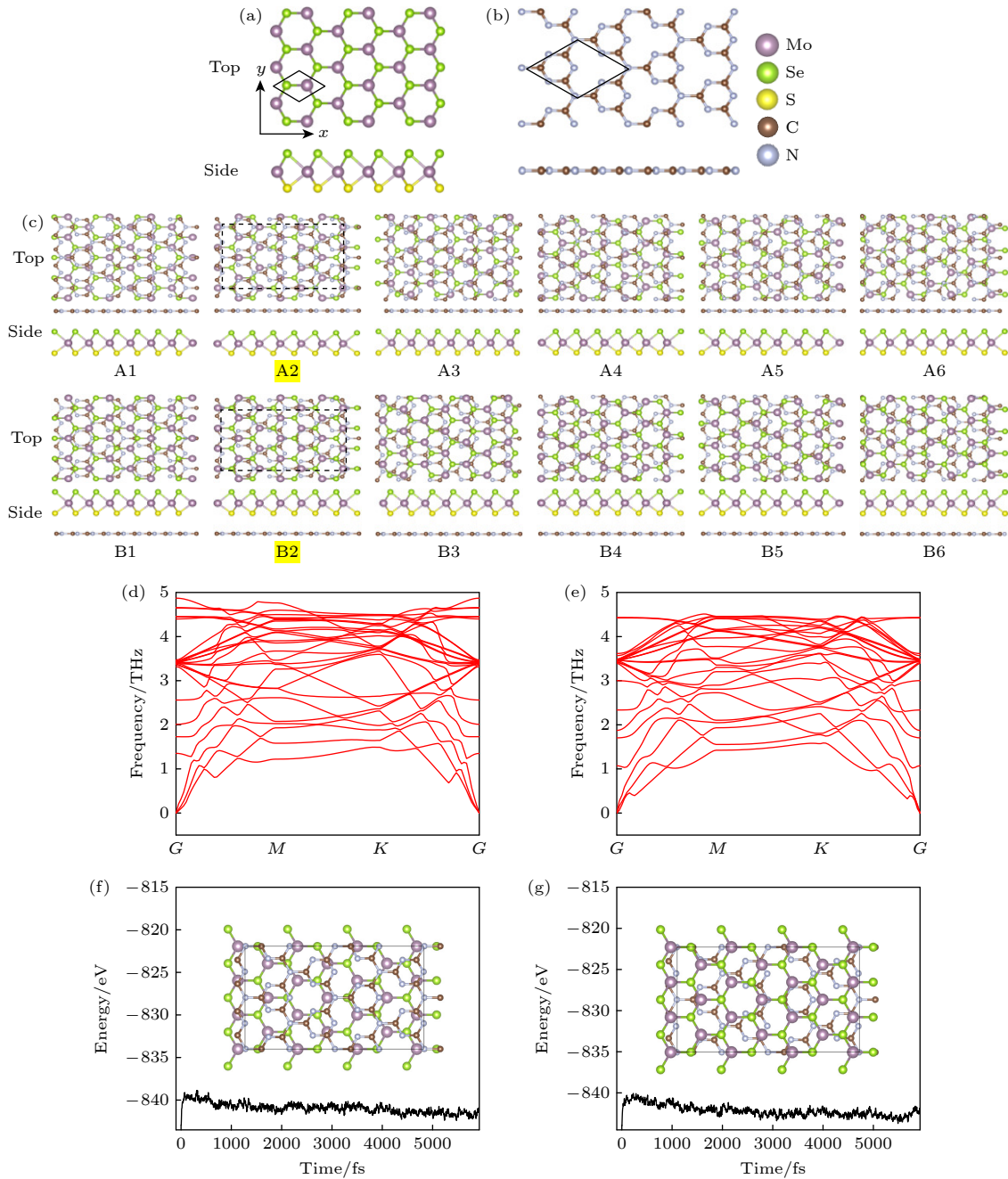


图1 (a) 单层 MoSSe 和 (b) $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 的俯视图和侧视图. 黑色框为 MoSSe 和 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 的单元结构; (c) SMoSe/ $g\text{-C}_3\text{N}_4$ (A1—A6) 和 SeMoS/ $g\text{-C}_3\text{N}_4$ (B1—B6) 不同堆叠构型的俯视图和侧视图, 其中 A2—A6, B2—B6 分别由 A1, B1 以 60° 间隔依次顺时针旋转 MoSSe 层得到的异质结构 (黑色虚线框内为最小超胞, A2 和 B2 上的阴影突出了结合能最低的堆叠构型); (d) A2 与 (e) B2 异质结构声子谱; (f) A2 与 (g) B2 异质结构 AIMD 模拟的能量变化

Fig. 1. (a) Top and side views of single-layer MoSSe and $g\text{-C}_3\text{N}_4$. The black box indicates the unit-cell structure of MoSSe and $g\text{-C}_3\text{N}_4$; (c) top view and side view of different stacking configurations of SMoSe/ $g\text{-C}_3\text{N}_4$ (A1—A6) and SeMoS/ $g\text{-C}_3\text{N}_4$ (B1—B6). Among them, A2—A6 and B2—B6 are heterostructures obtained by rotating the MoSSe layers of A1 and B1 clockwise by 60° respectively (the smallest computational supercell is indicated by the black dashed box, and the shadows on A2 and B2 highlight the stacked configuration with the lowest binding energy); Phonon spectrum of (d) A2 and (e) B2 heterostructure; AIMD simulation results for (f) the A2 and (g) B2 heterostructure.

其中 $E_{\text{MoSSe}/g\text{-C}_3\text{N}_4}$, E_{MoSSe} 和 $E_{g\text{-C}_3\text{N}_4}$ 分别代表相应结构优化后的能量; A 为界面面积. 如表 1 所列, 所有异质结构的黏附功均为正值, 表明结构整体稳定. 其中 A2 和 B2 构型的黏附功最大, 结构最为稳

定. 优化后, Janus MoSSe 层 S-Se 垂直距离保持为 $3.22 \text{ \AA}$, 与孤立 MoSSe 单层结构形貌一致. 受 Janus MoSSe 层影响, $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 层出现 $0.64 \text{ \AA}$ 的屈曲褶皱变形. A2 与 B2 构型中两层之间的垂直间

表 1 SMoSe/g-C₃N₄ (A1—A6) 和 SeMoS/g-C₃N₄ (B1—B6) 不同堆叠构型的黏附功Table 1. Adhesion energies for different stacking configurations of SMoSe/g-C₃N₄ (A1—A6) and SeMoS/g-C₃N₄ (B1—B6).

堆叠类型	A1	A2	A3	A4	A5	A6
黏附功/(J·m ⁻²)	0.135213	0.135218	0.135108	0.135205	0.134514	0.134329
堆叠类型	B1	B2	B3	B4	B5	B6
黏附功/(J·m ⁻²)	0.167633	0.167926	0.167737	0.167705	0.167188	0.167301

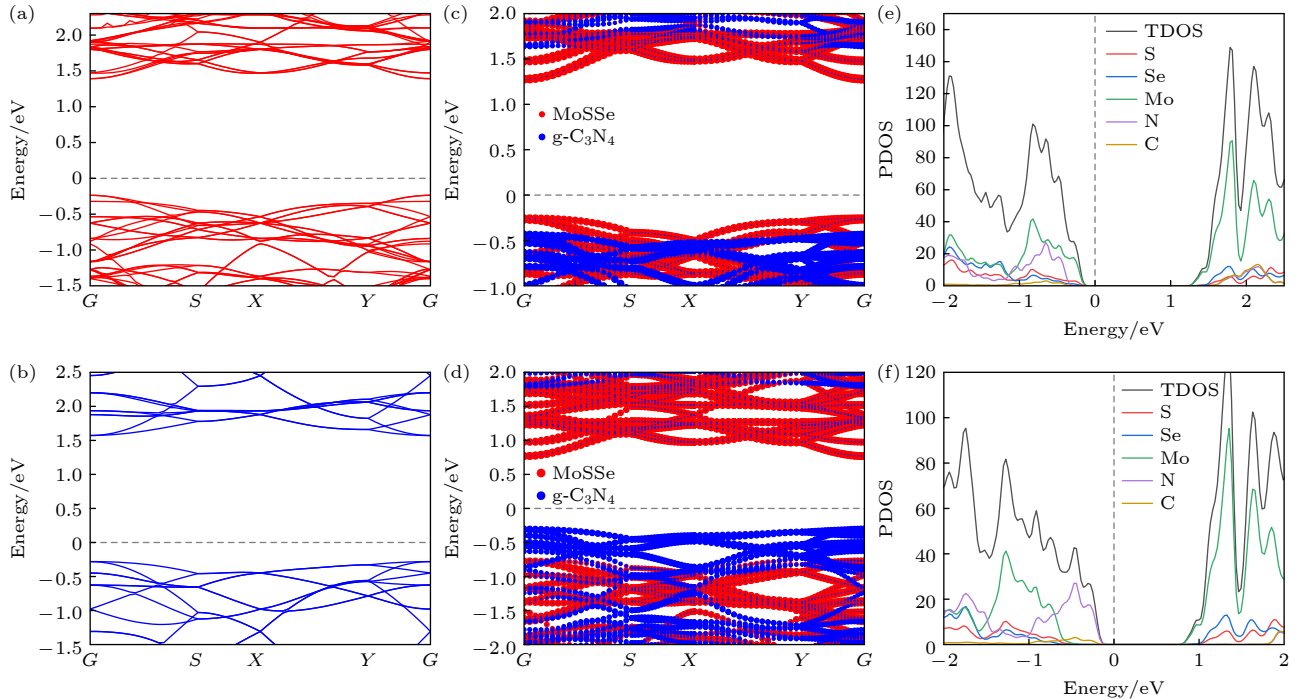


图 2 (a) 单层 MoSSe 和 (b) g-C₃N₄ 的能带; (c) A2 和 (d) B2 的投影能带 (费米能级均已设为 0); (e) A2 和 (f) B2 的投影态密度
Fig. 2. Energy band structures of single-layer (a) MoSSe and (b) g-C₃N₄; projected energy bands of (c) A2 and (d) B2 (Fermi levels have all been set to 0); projected densities of states of (e) A2 and (f) B2.

距分别为 3.18 Å 和 3.11 Å, 均处于典型的 vdW 作用范围内. 此外, 基于密度泛函微扰理论 (density functional perturbation theory, DFPT)^[46] 计算了 A2 与 B2 异质结的声子谱, 均无虚频出现, 验证了动力学稳定性 (图 1(d), (e)); 基于正则系综 (NVT) 的从头算分子动力学 (AIMD) 模拟进一步表明, 该结构在 300 K 下能量波动平稳, 具备良好的热力学稳定性 (图 1(f), (g)).

图 2(a)—(d) 展示了单层 MoSSe, g-C₃N₄ 的能带图以及 A2, B2 异质结的投影能带图, 可以看到异质结形成后带隙明显减小, A2 和 B2 的带隙分别为 1.53 eV 和 1.07 eV, 且均保持直接带隙特征. 值得注意的是, 异质结中 g-C₃N₄ 子层的带隙 (A2: 2.08 eV, B2: 2.10 eV) 均大于其孤立单层时的带隙 (1.85 eV), 这可归因于界面效应引起的结构畸变. 能带排列分析表明, A2 异质结呈现典型的 I 型能带结构 (CBM 和 VBM 均由 Janus MoSSe 层贡

献), 而 B2 异质结呈现 II 型能带结构 (CBM 和 VBM 分别由 Janus MoSSe 和 g-C₃N₄ 层贡献).

为进一步探究偶极矩的影响, 本文分别计算了 A2 和 B2 异质结的投影态密度 (PDOS) 和功函数. 图 2(e) 给出了 A2 异质结的 PDOS 分布, 其在费米能级附近的态密度主要源于 MoSSe 层中的 Mo 原子, 进一步证实了 A2 的 I 型能带特征. 图 2(f) 给出了 B2 异质结的 PDOS 分布, 其在费米能级附近的导带底态密度主要由 Mo 原子贡献, 价带顶态密度则主要源于 N 原子贡献, 与 B2 的 II 型能带特征相符.

功函数的计算公式为

$$\Phi = E_{\text{vac}} - E_{\text{f}}, \quad (3)$$

式中, E_{vac} 为真空能级, E_{f} 为对应的费米能级. 图 3(e) 和图 3(f) 分别展示了单层 Janus MoSSe 和 g-C₃N₄ 的静电势分布. 计算得到的功函数分别为 5.64 eV 和 4.69 eV. 单层 MoSSe 由于结构不

对称, 其 Se 原子面和 S 原子面之间存在 0.76 eV 的静电势差, 与已有研究结果吻合良好^[47–49].

图 3(a)–(d) 展示了 A2 与 B2 异质结的平面差分电荷密度, 可以看到形成异质结后, 组分间发生了电荷转移. A2 型异质结中, 电子耗尽区主要分布于 g-C₃N₄ 层及其孔洞下方的 Se 原子附近; B2 型异质结中, 电子耗尽区主要分布于 g-C₃N₄ 层及其孔洞上方的 S 原子区域. 两种异质结构中, 电

子积聚区均集中于界面区域. 电子均从低功函数的 g-C₃N₄ 层转移至高功函数的 MoSSe 层, 在界面处形成由 g-C₃N₄ 指向 MoSSe 的内建电场.

图 3(g) 和图 3(h) 展示了 A2 与 B2 型异质结的静电势分布, 计算得到的功函数分别为 5.74 eV 和 5.03 eV. 两种异质结构中同时存在由于电荷转移形成的界面电场和 MoSSe 固有的偶极电场. 在 A2 型异质结中, 界面电场与 MoSSe 固有偶极场

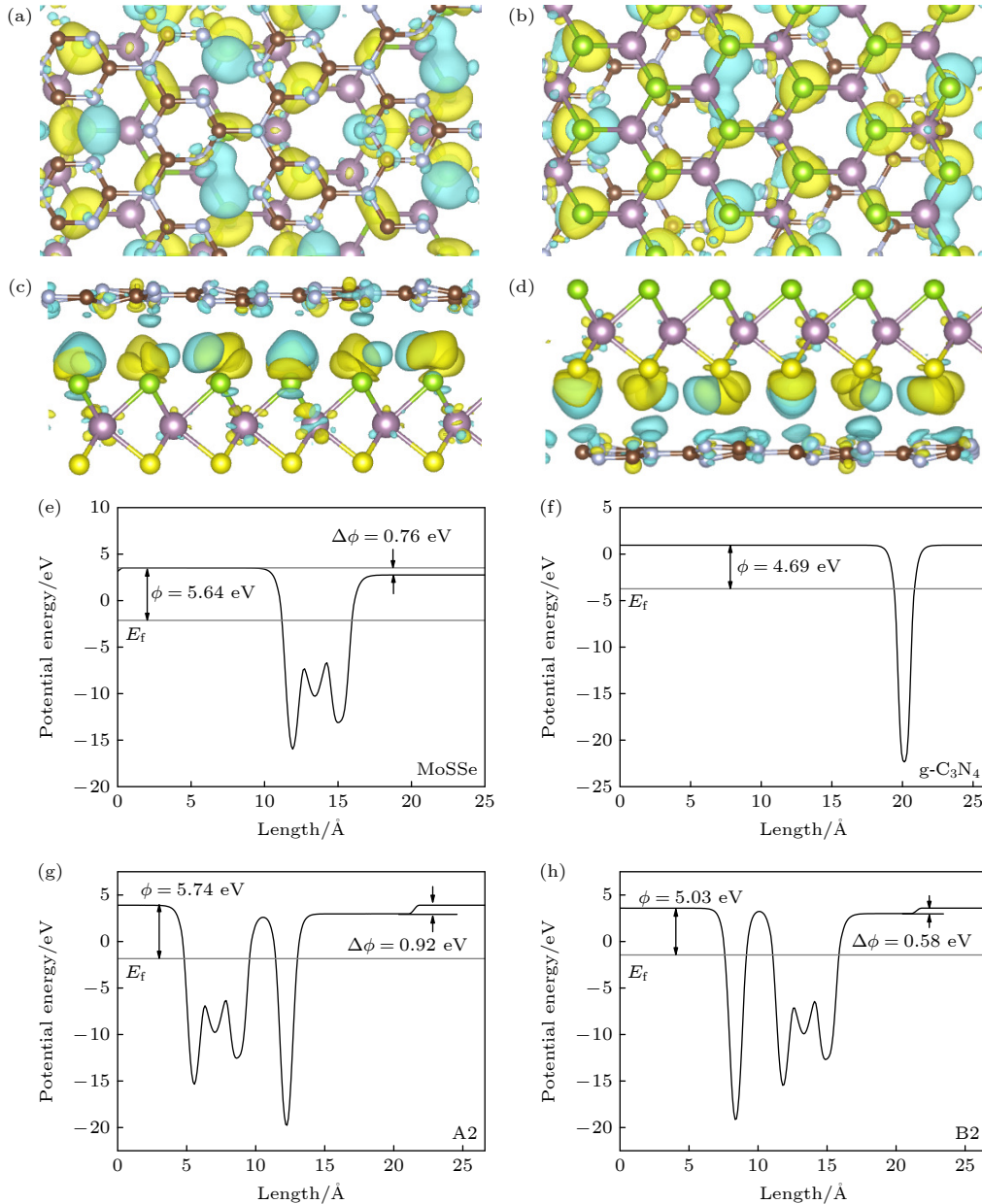


图 3 (a), (c) A2 差分电荷密度俯视图和侧视图; (b), (d) B2 差分电荷密度俯视图和侧视图 (黄色为正, 代表电子积聚; 蓝色为负, 代表电子消耗); (e), (f) 单层 MoSSe 和 g-C₃N₄ 的静电势; (g), (h) A2 和 B2 的静电势

Fig. 3. (a), (c) Differential charge density diagrams for top view and side view of A2; (b), (d) differential charge density diagrams for top view and side view of B2 (yellow indicates positive, representing electron accumulation; blue indicates negative, representing electron consumption); (e), (f) the electrostatic potential of the single-layer MoSSe and g-C₃N₄; (g), (h) the electrostatic potentials of A2 and B2.

方向一致, 两者协同作用促进载流子的迁移. 在 B2 异质结中两者方向相反, 但净电场仍与 MoSSe 固有偶极场方向一致, 表明 MoSSe 的固有偶极场在调控界面电荷行为中起主导作用.

最后, 基于 HSE06 杂化泛函^[50] 计算获得了各结构更精确的带边位置 (图 4), 以评估其光催化水分解潜力. 图 4 中灰色和红色虚线分别代表 pH = 0 和 pH = 7 条件下的水氧化电位 (-5.67 eV 和 -5.26 eV) 及还原电位 (-4.44 eV 和 -4.03 eV), 这些带隙均超过水分解所需的电位差 (1.23 eV). 在 pH = 0 和 pH = 7 条件下, 单层 g-C₃N₄ 的 CBM 高于对应的水还原电位, 且 VBM 高于 -5.67 eV, 因此可以驱动析氢反应 (HER). 单层 Janus MoSSe

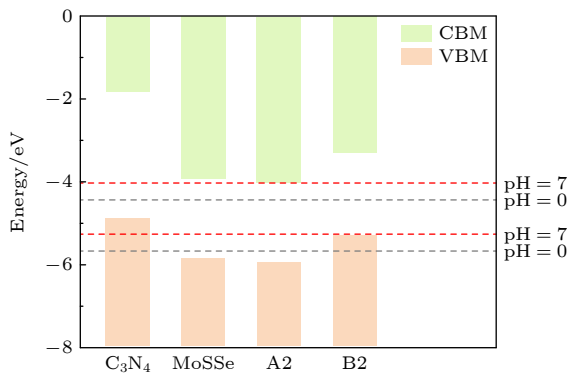


图 4 MoSSe, g-C₃N₄, A2 和 B2 异质结在不同 pH 值下的带边位置

Fig. 4. Band edge positions of MoSSe, g-C₃N₄, A2 and B2 heterostructures at different pH values.

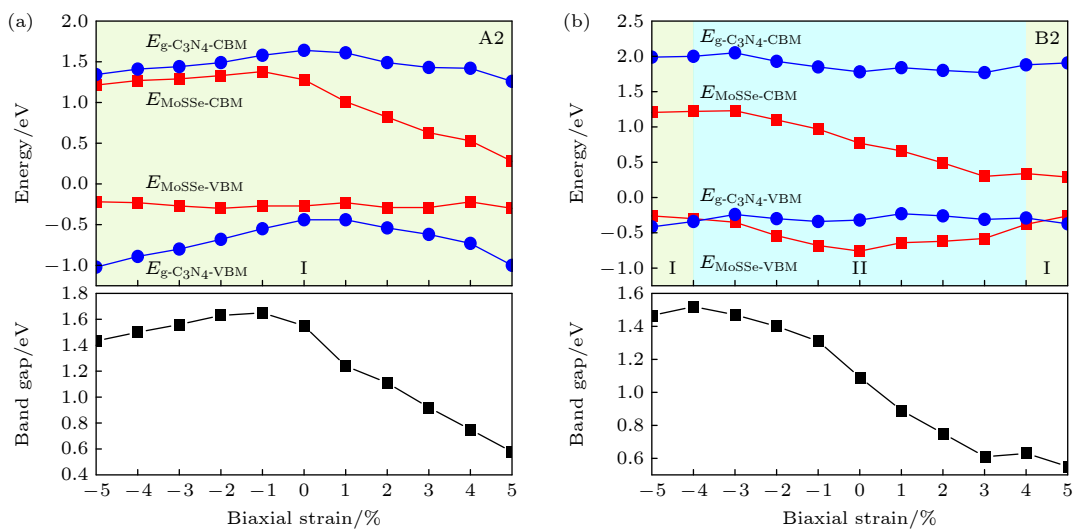


图 5 (a) A2 和 (b) B2 异质结构带边位置及带隙值随应变的变化

Fig. 5. Dependences of the band edge positions and band gap values of the A2 (a) and B2 (b) heterostructures on the applied biaxial strain.

的能带带边同时跨越水的氧化和还原电位, 可驱动水的氧化还原反应实现全分解水. 相较于单层组分材料, A2 型异质结带边同时跨越氧化还原电位且带隙更小, 表现出更强的光催化分解水活性. B2 型异质结在 pH = 0 时还原能力增强; 在 pH = 7 时则可同时驱动析氢和析氧反应, 其活性高于单层 g-C₃N₄. 以上结果表明, 通过合理设计异质结界面, 可有效调控其能带结构与催化性能.

3.2 应变调控

应变工程是调控半导体材料及其异质结构电子能带性能的有效手段之一. 本文通过对 Janus MoSSe/g-C₃N₄ 异质结构施加面内双轴应变, 系统地研究其对电子性质的影响规律. 图 5(a) 和图 5(b) 展示了 A2 和 B2 两种异质结在不同双轴应变 (拉应变为正, 压应变为负) 下的带边位置及带隙变化. 两种结构内部均存在由 g-C₃N₄ 层指向 Janus MoSSe 层的内建电场. 结果表明, 带隙对应变具有显著依赖. 在 -5% — -1% 应变范围内, A2 型异质结的带隙随压应变增大而逐渐减小; 在 -1% — 5% 的应变范围内, 随着拉应变的增大 (压应变的减小) 而进一步减小; B2 型异质结的带隙在 -4% 压应变时达到最大值, 随后在 -4% — 5% 的应变范围内随着压应变的减小 (拉应变的增大) 而逐渐减小. 值得关注的是, 当施加 -4% 压应变或 5% 拉应变时, B2 型异质结的能带排列由 II 型转变为 I 型 (图 5(b)), 表明应变可有效调控其能带对齐方式.

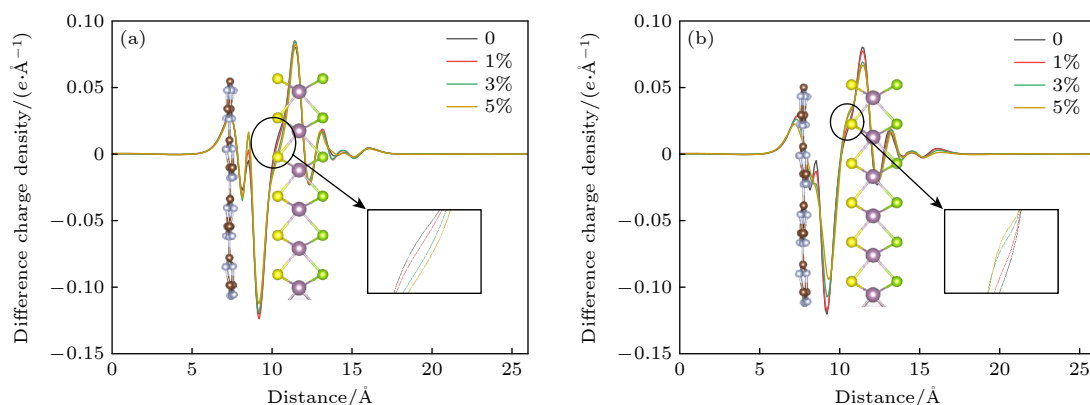


图 6 (a) B2 异质结构在不同拉应变作用下的平面平均差分电荷密度; (b) B2 异质结构在不同压应变作用下的平面平均差分电荷密度

Fig. 6. (a) Planar average differential charge density of B2 heterostructure under different tensile strains; (b) planar average differential charge density of B2 heterostructure under different compressive strains.

在较小应变下, B2 型异质结的电子性质仍由其本征内建电场主导; 而当应变增大到一定数值时, 应变效应占主导地位, 从而驱动能带对齐类型的转变。

为了深入地理解 B2 型异质结在-4% 压应变和 5% 拉应变作用下能带对齐类型的转变机制, 本文进一步分析了对其电子结构. 图 6(a) 和图 6(b) 展示了 B2 型异质结在不同双轴应变状态下沿面外方向 (Z 方向) 的平面平均差分电荷密度分布. 从图 6 中可观察到, 电子显著聚集于 Janus MoSSe 层附近的界面区域, 而空穴则主要分布于 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 层附近, 形成典型的空间电荷分离结构. 该电荷重新分布诱导产生内建电场, 从而促进光生载流子的有效分离. 双轴应变的施加可进一步调节载流子密度进而改变内建电场的强度, 而内建电场是驱动光生载流子对分离的关键因素。

4 结 论

本文基于第一性原理计算, 系统研究了 SMOSe/ $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 和 SeMoS/ $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 两类异质结构的电子性质, 重点考察了堆叠构型、层间距以及双轴应变对其性能的调控机制. 研究表明, 两类异质结均具有较低的晶格失配率和良好的结构稳定性. 与单层组分相比, 异质结的带隙明显减小, 有利于增强其光催化分解水活性. 静电势与差分电荷密度分析表明, 界面处存在由 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 指向 MoSSe 层的电荷转移, 形成内建电场, 并且导致不同的能带对齐方式: SMOSe/ $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 异质结为 I 型能带结构, 其 CBM

与 VBM 均由 MoSSe 贡献; 而 SeMoS/ $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 异质结则为 II 型能带结构, CBM 和 VBM 分别源于 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 和 MoSSe 层. 值得关注的是, SeMoS/ $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 异质结在-4% 的压应变和 5% 拉应变作用下可实现 II 型到 I 型能带排列的转变. 应变还可有效调节能带带隙大小, 促进电子向导带跃迁, 提升界面电荷转移效率, 从而进一步增强其光催化性能. 本研究揭示了应变工程在调控二维异质结电子性质方面的有效性, 为设计基于此类异质结的光电器件提供了重要理论依据。

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Tománek D 2020 *Phys. Rev. Mater.* **4** 030001
- [3] Tian H, Chin M L, Najmaei S, Guo Q S, Xia F N, Wang H, Dubey M 2016 *Nano Res.* **9** 1543
- [4] Zhang H Z, Xu C Y, Nan H Y, Xiao S Q, Gu X F 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 246101 (in Chinese) [张浩哲, 徐春燕, 南海燕, 肖少庆, 顾晓峰 2020 *物理学报* **69** 246101]
- [5] Jia L G, Liu M, Chen Y Y, Zhang Y, Wang Y L 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 127308 (in Chinese) [贾亮广, 刘猛, 陈瑶瑶, 张钰, 王业亮 2022 *物理学报* **71** 127308]
- [6] Zhang J, Jia S, Kholmanov I, Dong L, Er D, Chen W, Ruoff R S 2017 *ACS Nano* **11** 8192
- [7] Lu A Y, Zhu H, Xiao J, Chuu C P, Han Y, Chiu M H, Li L J 2017 *Nat. Nanotechnol.* **12** 744
- [8] Yao Q F, Cai J, Tong W Y, Gong S J, Wang J Q, Wan X, Duan C G, Chu J 2017 *Phys. Rev. B* **95** 165401
- [9] Hu T, Jia F, Zhao G, Wu J, Stroppa A, Ren W 2018 *Phys. Rev. B* **97** 235404
- [10] Cheng Y C, Zhu Z Y, Tahir M, Schwingenschlogl U 2013 *Europhys. Lett.* **102** 57001
- [11] Xia C X, Xiong W Q, Du J, Wang T X, Peng Y T, Li J B 2018 *Phys. Rev. B* **98** 165424
- [12] Zhang Y H, Li X B, Zhan C X, Wang M Q, Pu Y X 2023

- Acta Phys. Sin.* **72** 046201 (in Chinese) [张宇航, 李孝宝, 詹春晓, 王美芹, 浦玉学 2023 物理学报 **72** 046201]
- [13] Dong L, Lou J, Shenoy V B 2017 *ACS Nano* **11** 8242
- [14] Er D Q, Ye H, Frey N C, Kumar H, Lou J, Shenoy V B 2018 *Nano Lett.* **18** 3943
- [15] Guan Z, Luo N, Ni S, Hu S 2020 *Mater. Adv.* **1** 244
- [16] Tao S, Xu B, Shi J, Zhong S, Lei X, Liu G, Wu M 2019 *J. Phys. Chem. C* **123** 9059
- [17] Zhao H, Chen X, Jia C, Zhou T, Qu X, Jian J, Xu Y, Zhou T 2005 *Mater. Sci. Eng. B* **122** 90
- [18] Bojdys M J, Müller J O, Antonietti M, Thomas A 2008 *Chem. Eur. J.* **14** 8177
- [19] Tsang A C H, Kwok H Y H, Leung D Y C 2017 *Solid State Sci.* **67** A1
- [20] Coros M, Pogacean F, Magerusan L, Socaci C, Pruneanu S 2019 *Mater. Sci.* **13** 23
- [21] Feng S N, Mi W B 2018 *Appl. Surf. Sci.* **458** 191
- [22] Chen H Y, Zhang S H, Jiang W, Zhang C X, Guo H, Liu Z, Wang Z M, Liu F, Niu X B 2018 *J. Mater. Chem. A* **6** 11252
- [23] Wang X, Ma J, Fan H 2023 *J. Chem. Inf. Model.* **63** 4708
- [24] Yuan Y J, Shen Z, Wu S, Su Y, Pei L, Ji Z, Zou Z 2019 *Appl. Catal., B* **246** 120
- [25] Zhu B C, Zhang L Y, Cheng B, Yu Y, Yu J G 2021 *Chin. J. Catal.* **42** 115
- [26] Wu Z S, He X F, Xue Y T, Yang X, Li Y F, Li Q B, Yu B 2020 *Chem. Eng. J.* **399** 125747
- [27] Zhang X, Tian F, Lan X, Liu Y, Yang W, Zhang J, Yu Y 2022 *Chem. Eng. J.* **429** 132588
- [28] Wang J, Lu Q, Zhao S 2019 *Appl. Surf. Sci.* **470** 150
- [29] Zhang M, Xu J, Zong R, Zhu Y 2014 *Appl. Catal., B* **147** 229
- [30] Ma X, Lv Y, Xu J, Liu Y, Zhu Y 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 23485
- [31] Liu J, Li Y B, Arumugam S, Jin X 2016 *Appl. Surf. Sci.* **364** 694
- [32] Yao W Q, Sun J Z, Chen J Y, Guo Y L, Wu B, Liu Y Q 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 027901 [姚文乾, 孙健哲, 陈建毅, 郭云龙, 武斌, 刘云圻 2021 物理学报 **70** 027901]
- [33] Liao Y M, Chen X M, Xu H L, Yi S S, Wang H, Huo D X 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 097101 (in Chinese) [廖玉民, 陈许敏, 徐黄雷, 易水生, 王辉, 霍德璇 2025 物理学报 **74** 097101]
- [34] Geim A K, Grigorieva I V 2013 *Nature* **499** 419
- [35] Withers F, Del Pozo-Zamudio O, Mishchenko A, Rooney A P, Novoselov K S 2015 *Nat. Mater.* **14** 301
- [36] Massicotte M, Schmidt P, Vialla F, Schädler K G, Koppens F H L 2016 *Nat. Nanotechnol.* **11** 42
- [37] Yan X, Liu C, Li C, Bao W, Ding S, Zhang D W, Zhou P 2017 *Small* **13** 1701478
- [38] Sarkar D, Xie X, Liu W, Cao W, Kang J, Gong Y, Kraemer S, Ajayan P M, Banerjee K 2015 *Nature* **526** 91
- [39] Ye J, Liu J, An Y 2020 *Appl. Surf. Sci.* **501** 144262
- [40] Liu H D, Yang L, Wang T Y, Wei X B, Sun S H, Zhao Y S 2025 *Physica B* **700** 416941
- [41] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [42] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [43] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [44] Grimme S, Antony J, Ehrlich S, Krieg H 2010 *J. Chem. Phys.* **132** 154104
- [45] Pei S 2024 *New J. Phys.* **26** 043014
- [46] Baroni S, de Gironcoli S, Corso A D, Giannozzi P 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 515
- [47] Deng D W, Si R T, Wen B, Seriani N, Wei X L, Yin W J 2023 *J. Mater. Chem. A* **11** 22360
- [48] Liu C X, Dai Z H, Hou J, Liu W G, Ren X B, Gu S T 2024 *J. Phys. Chem. Solids* **185** 111782
- [49] Xu X, Jiang X, Gao Q, Yang L, Sun X, Wang Z, Liu D 2022 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24** 29882
- [50] Heyd J, Scuseria G E, Ernzerhof M 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 8207

Electronic properties and biaxial strain regulation of Janus-MoSSe/g-C₃N₄ heterostructures^{*}

HU Dong LI Xiaobao[†] WANG Meiqin

(School of Civil Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

(Received 27 August 2025; revised manuscript received 28 September 2025)

Abstract

Constructing van der Waals (vdW) heterostructures has emerged as an effective strategy for enriching the physical properties of two-dimensional materials and optimizing their optoelectronic performance. In this work, we systematically investigate the electronic properties and biaxial strain modulation of Janus MoSSe/g-C₃N₄ heterostructures with two distinct interfacial configurations—SMoSe/g-C₃N₄ and SeMoS/g-C₃N₄—by means of first-principles simulations. Binding energy comparisons and AIMD simulations are performed to determine the most stable stacking pattern of each type of the heterostructure. The analyses of the electrostatic potential and work function reveal that the intrinsic dipole of MoSSe layer and the interfacial electric field in the SMoSe/g-C₃N₄ heterostructure undergo a constructive superposition. This enhances the overall built-in electric field, which points from g-C₃N₄ layer to MoSSe layer, resulting in a type-I band alignment. In contrast, in the SeMoS/g-C₃N₄ configuration, the two fields oppose each other, leading to a net electric field directed from MoSSe to g-C₃N₄ layer. This leads to a type-II band alignment, which facilitates spatial carrier separation and significantly enhances photocatalytic water-splitting activity. Furthermore, this study also demonstrates that biaxial strain can effectively modulate the electronic band structures of both types of heterostructures. In particular, the SeMoS/g-C₃N₄ system exhibits a reversible transition between type-I and type-II band alignments under specific compressive (−4%) and tensile (+5%) strain states. The underlying mechanism is elucidated by the difference charge density calculations. This study provides theoretical insights into the role of interfacial and intrinsic dipoles combined with strain engineering, offering a viable route for designing efficient MoSSe/g-C₃N₄-based photocatalysts and optoelectronic devices.

Keywords: heterostructure, electronic band structure, strain engineering, first-principles simulations

DOI: 10.7498/aps.75.20251158

CSTR: 32037.14.aps.75.20251158

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Anhui Province, China (Grant No. 2208085MA17).

[†] Corresponding author. E-mail: xiaobaoli@hfut.edu.cn

Janus MoSSe/g-C₃N₄异质结的电子性质及其双轴应变调控

胡栋 李孝宝 王美芹

Electronic properties and biaxial strain regulation of Janus-MoSSe/g-C₃N₄ heterostructures

HU Dong LI Xiaobao WANG Meiqin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 010702 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251158

CSTR: 32037.14.aps.75.20251158

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251158>

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

GaS/Mg(OH)₂异质结电子结构的第一性原理研究

First-principles study on electronic structure of GaS/Mg(OH)₂ heterostructure

物理学报. 2024, 73(13): 137103 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231979>

电场对GaN/g-C₃N₄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 GaN/g-C₃N₄ heterojunction

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

低维材料物性的非均匀应变调控

Engineering of properties of low-dimensional materials via inhomogeneous strain

物理学报. 2022, 71(12): 127307 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220085>

边修饰Net-Y纳米带的电子结构及机械开关特性的应变调控效应

Strain engineering of electronic structure and mechanical switch device for edge modified Net-Y nanoribbons

物理学报. 2022, 71(4): 046102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211748>

铁电极化翻转对硅烯异质结中电子性质的调控

Control of electric properties of silicene heterostructure by reversal of ferroelectric polarization

物理学报. 2022, 71(17): 177303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220815>

应变调控反钙钛矿型Li₃OCl电子结构和光学性质

Strain-tuned electronic structure and optical properties of anti-perovskite Li₃OCl

物理学报. 2025, 74(17): 177101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250588>