

关于二维材料带隙调控方法的综述

阮世豪

上海理工大学理学院, 上海

收稿日期: 2023年4月17日; 录用日期: 2023年5月22日; 发布日期: 2023年5月29日

摘要

自从石墨烯从石墨中成功剥离出来, 二维材料的相关研究达到了高潮。因为二维材料的优异性能, 它在各个领域都有很多潜在的应用。但是有些二维材料在应用中无法达到所需要的带隙范围, 比如: 石墨烯的零带隙限制了它在光电子器件方面的应用。为了更好地实现二维材料的应用, 研究人员找到了很多方法, 对二维材料的带隙进行调控, 比如: 施加应力、电场、原子掺杂、构建异质结构等。本文综述了对二维材料的带隙调控的几种方法, 着重分析了他们的调控机理以及相关的研究, 并对二维材料的带隙调控方法的应用进行总结性展望。

关键词

二维材料, 应力, 电场, 掺杂, 异质结构

Overview of Bandgap Control Methods for 2D Materials

Shihao Ruan

College of Science, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Apr. 17th, 2023; accepted: May 22nd, 2023; published: May 29th, 2023

Abstract

Since graphene was successfully stripped from graphite, research on two-dimensional materials has reached a climax. Due to the excellent performance of two-dimensional materials, they have many potential applications in various fields. However, some two-dimensional materials cannot achieve the required bandgap range in applications, such as the zero bandgaps of graphene, which limits its application in optoelectronic devices. In order to better achieve the application of two-dimensional materials, researchers have found many methods to regulate the bandgap of two-dimensional materials, such as applying stress, electric field, atomic doping, and constructing hete-

rostructures. This article reviews several methods for regulating the bandgap of two-dimensional materials. Focused on analyzing their regulatory mechanisms and related research, it provides a summary and prospect for the application of bandgap regulation in binary materials.

Keywords

Two-Dimensional Materials, Stress, Electric Field, Doped, Heterostructure

Copyright © 2023 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

自从石墨烯成功剥离出来后[1], 越来越多的研究人员加入到二维材料研究的相关领域中来。二维过渡金属硫族化合物[2] [3] [4] [5]、硅烯[6]、锗烯[7]以及六方氮化硼[8], 逐渐被研究人员合成出来。在过去的几年中, 二维材料已成为材料科学与技术领域内一个备受关注的领域, 因为它们拥有许多传统材料无法比拟的优异性能。然而, 有些二维材料在应用中无法达到所需要的带隙范围, 这一点是不容忽视的。石墨烯是零带隙的, 单层的氮化硼[9]和单层氮化铝[10] [11]有较大的带隙; 单层的 InN [12] [13]具有较小的带隙。其中, 石墨烯的零带隙限制了它在光电子器件方面的应用, 并且限制了其在实际中的应用价值。为了更好地实现二维材料的应用, 研究人员也提出了许多方法来对其带隙进行调控。其中, 通过施加应力[14]和电场[15] [16], 使其电子结构发生变化, 可以达到调节带隙的目的。另外, 利用原子掺杂的方法[17], 将不同的原子引入到材料中, 可以有效地改变材料的电子结构, 进而改变其带隙。此外, 构建异质结构是另一个有趣的方法[18], 不同的二维材料相互堆叠, 从而形成新的结构和能带类型。利用这些方法, 研究人员成功地构建了具有调控带隙能力的二维材料, 总之, 通过对二维材料带隙的调控, 研究人员可以更好地利用这些材料的性质来开发创新型的应用。

2. 带隙调控方法

2.1. 施加应力对二维材料带隙的调控

在二维材料的研究中, 施加应力是一种有效的控制二维材料性质的手段, 能够调节带隙等方面的性质。二维材料对外界应力的响应与三维材料不同, 拉伸或压缩对二维材料容易实现, 因此应力对二维材料带隙的调控成为一种很好的调控方法。施加应力可以使二维材料的晶格发生畸变, 影响能带结构, 从而调控材料的带隙大小。施加正应力可以使材料晶格间距减小, 导致能带向高能级移动, 从而使带隙减小。而施加负应力则能使晶格间距增大, 从而使能带向低能级移动, 使得带隙增大。此外, 当施加应力的形式是非均匀的时候, 会形成内在的晶格畸变和局部应力区域。这些局部区域对材料的电子结构和能量能够有相对独立的影响, 从而实现对材料性质的有选择的调控。

近年来, 基于施加应力的调控二维材料带隙的研究取得了很多进展, 下面将简要介绍几个典型的研究案例。首先, 通过调控应力可以改变材料带隙的大小和类型, Behera 等人计算了单层氮化镓带隙结构随应力改变的变化趋势[19]。他们发现通过施加双轴应变, 单层 GaN 的带隙是可调的。当双轴压缩应变达到 3% 左右时, 材料由间接带隙转变为直接带隙; 屈曲和拉伸应变降低了带隙值, 当拉伸应变为 6.36% 时, 带隙减少到其未加应变值的 50%; 当外界拉伸应变为 12.72% 时, 带隙减少到 0 eV; Wang 等人探究

了双轴应力对 2D-TiB₁₂ 结构的调控, 当施加高达 10% 的压缩和拉伸应变可以将材料的功函数调节在 5.0 至 5.75 eV 的范围内。通过施加外部应变, 可以观察到材料从半导体到半金属的变化[20]; Hao 等人研究了施加应力后, 单层的 III 族氮化物材料的带隙的变化, 发现随着双轴压应力从 -10% 到 10% 的变化过程中, 材料的带隙随着应力的变化表现为先增大后减小。施加应力, 单层的 III 族氮化物材料的带隙有很大的变化, 这样扩展了材料的带隙范围[21]。Yang 等人对单层 WSe₂ 进行了施加应力研究, 发现在施加 1%~13% 的应力时, 带隙随着应力的增加而减小, 但是带隙的类型没有发生变化, 依旧是直接带隙; 当施加的应变大于 13% 时, 单层 WSe₂ 的带隙变为 0, 体系表现出金属性。当对它施加 -1% 的应变时, 材料的带隙类型发生了变化, 变为间接带隙。应力继续增加, 能带类型保持间接带隙不变, 带隙值随着减小。当应力为 -7% 时, 带隙为 0 eV [22]。

通过施加应力来调控二维材料的带隙已经成为一种有效的方法。首先, 施加应力对二维材料的带隙有显著影响。施加垂直于二维材料表面的拉应力通常会导致带隙增大, 而压应力则会导致带隙缩小[19]-[26]。这是因为应力会改变二维材料内部的晶格结构, 从而影响其电子结构。施加拉应力会减小晶格常数, 增加电子能带之间的距离, 从而导致带隙增大。相反, 施加压应力会增大晶格常数, 增加电子能带之间的重叠, 从而导致带隙缩小。施加应力还可以改变二维材料的带隙类型, 在直接带隙和间接带隙之间发生变化, 比如: 对 WSe₂ [22] [27]、MoS₂ [28]、WS₂ [29]、锑烯[30]、BP [31] 等材料施加应力, 会改变它们的能带类型。施加应力对带隙的调控还与二维材料的层数有关, Bolotin 等人报道了单层和双层 MoS₂ 在单轴拉伸应变下的带隙结构变化, 发现当施加 1% 的拉伸应变时, 单层 MoS₂ 的带隙减小了约 45 meV, 而双层 MoS₂ 的降低了约 120 meV [32]。此外, 施加应力的方向和大小对带隙的调控有很大的影响。研究表明, 施加沿着晶格方向的应力比施加沿着晶格垂直方向的应力更容易导致带隙变化。施加更大的应力会导致更显著的带隙变化效应[33], 如图 1 所示。

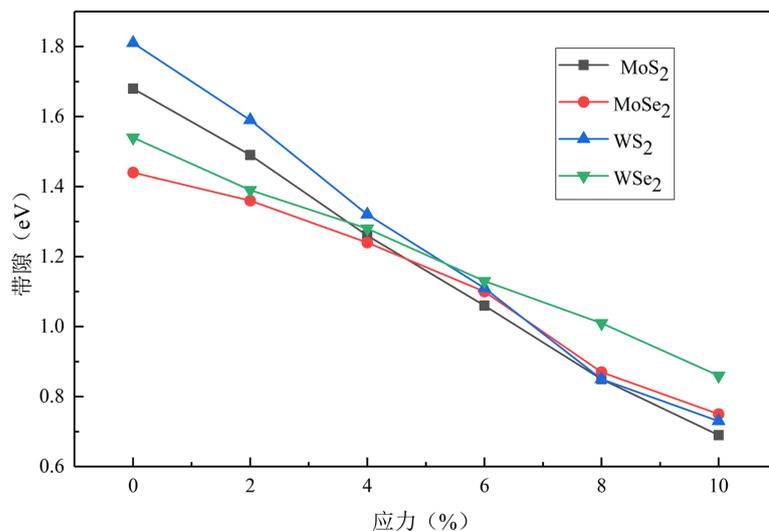


Figure 1. The change of bandgap of MoS₂, MoSe₂, WS₂, and WSe₂ with stress
图 1. MoS₂、MoSe₂、WS₂、WSe₂ 的带隙随应力变化

总的来说, 施加应力是一种有效的方法来控制二维材料的带隙。近年来的研究表明, 施加应力对二维材料带隙大小的调节是可控的, 该方法可以通过调整应力的方向和大小来实现对带隙的调控。施加应力对带隙的调控范围广泛, 它可以在不引入其他外界因素的情况下调节材料的电子结构; 可以在短时间内实现对二维材料的控制, 这对于实时响应需求较高的应用来说非常有利。应力可以被瞬间施加和撤销,

施加应力具有更好的可逆性。但是它也有一些缺陷，施加应力一般需要精细的设计，比如应力大小、方向和施加方式等；施加应力的效果与具体施加条件密切相关，并且其效应难以量化，这对于深入理解物理机制和进行可重复性实验来说也带来了困难。在未来的研究中，继续探究不同的应力和施加应力的方式，以更全面实现对二维材料的带隙的调控。

2.2. 施加电场对二维材料带隙的调控

施加电场可以调节二维材料的能带结构，从而控制其带隙大小。施加电场通过改变二维材料内部的原子间距和原子间的相互作用，调整能带结构，进而改变材料的带隙大小。其中，对于 MoS_2 ， WSe_2 等材料，施加电场能够形成巨大的电极化，导致电荷重排，从而实现电场调控带隙的能力。对于具有共价性的材料，可以通过改变自旋轨道耦合，实现电场调节带隙。

近年来，围绕电场调控二维材料带隙的研究取得了很多重要的进展，下面将简要介绍几个典型的研究案例。比如：施加垂直电场可以调节单层二维材料的带隙，Li 等人研究发现，对锗烯施加外电场，可以调控锗烯的能带结构，在不同的电场作用下，锗烯的能带结构，可以被调控为金属，半导体或绝缘体[34]。在电场的调控下，锗烯相关的材料可以更好的应用于自旋电子设备。Xia 等人研究了对 $\text{SnS}_2/\text{n-BN}$ 异质结构施加外电场，可以观察到能带结构的直接到间接跃迁以及能带类型的 I 型到 II 型跃迁[35]。实验结果显示异质结中的带隙可以被有效调节，同时还能实现电子态密度的调节。因此，应用外部电场是实现 $\text{SnS}_2/\text{n-BN}$ 体系能带结构调控的有效方法。Pan 等人研究了外加电场对不同层数 SnS 材料的调控，随着外电场的增加，单层 SnS 的能带发生劈裂。随着电场的增加，带隙逐渐减小至消失，带隙类型并没有变化[36]。近期研究还发现，施加旋转电场也可以调控二维材料的带隙，还可以产生新的拓扑态和拓扑相变。

首先，施加电场强度和方向对带隙的调控会产生影响。很多研究表明，施加更大的电场强度会导致更显著的带隙变化效应[37] [38] [39]。例如：随着外加电场的增加， Ti_2CO_2 的带隙类型保持不变，但带隙值逐渐变小[37]，变化如图 2 所示；对 BN 片施加电场，当外加电场强度从 0 增加到 0.015 au 时，带隙也随着由 4.45 eV 减小至 0.3 eV [38]。不同方向的外加电场也会导致对带隙的调控效果不同，Liu 等人研究了不同方向施加电场对石墨烯带隙调控的影响，发现不同方向的电场对石墨烯带隙的调制效果不同[40]，如图 3 所示。

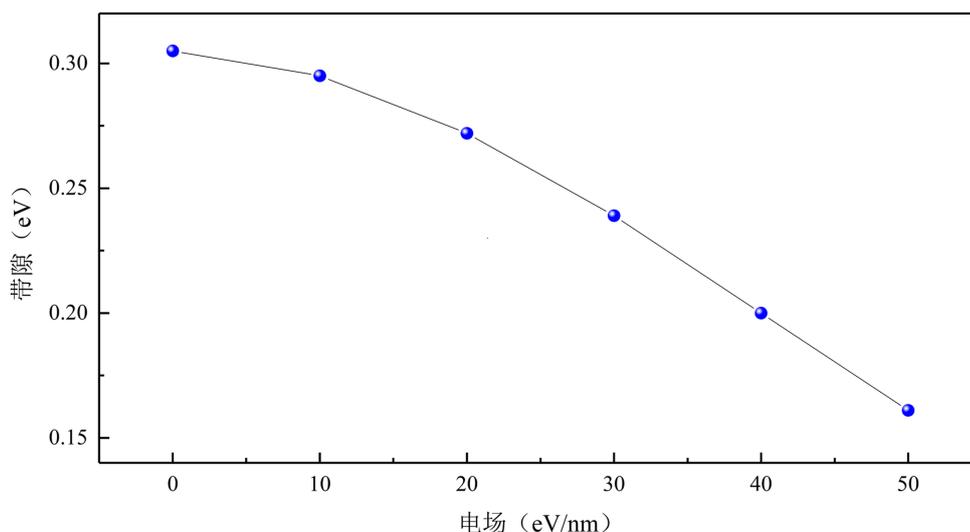


Figure 2. Bandgap variation curve of Ti_2CO_2 with electric field

图 2. Ti_2CO_2 的带隙随电场变化曲线

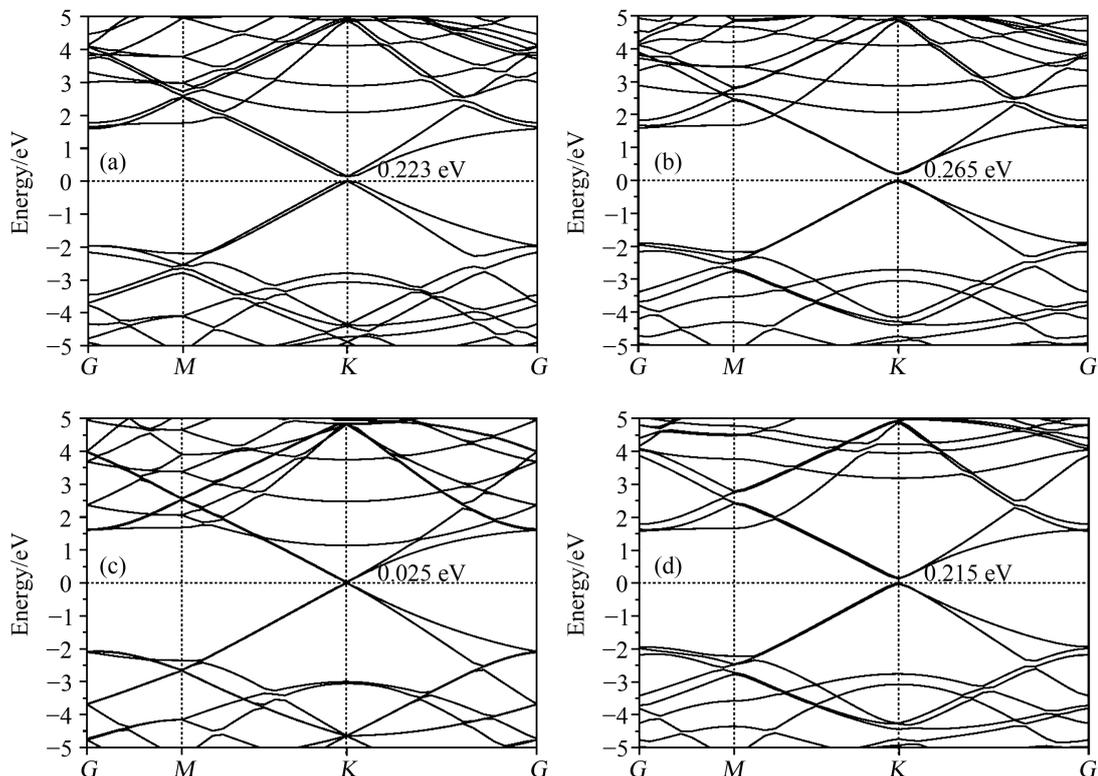


Figure 3. The band structure of graphene in electric fields of different directions; (a) Electric field direction $\langle 100 \rangle$; (b) Electric field direction $\langle 010 \rangle$; (c) Electric field direction $\langle 001 \rangle$; (d) Electric field direction $\langle 110 \rangle$ [40]

图 3. 不同方向电场作用下石墨稀的能带结构; (a) 电场方向 $\langle 100 \rangle$; (b) 电场方向 $\langle 010 \rangle$; (c) 电场方向 $\langle 001 \rangle$; (d) 电场方向 $\langle 110 \rangle$ [40]

其次，不同类型的二维材料对电场的响应也会有所不同。石墨烯的带隙相对不太容易被电场调控，而 MoS_2 等过渡金属硫化物则更容易被电场调控。电场对不同层数的二维材料能带的调制效果也有不同。当施加外部电场时，单层石墨烯的能带结构不容易被调制，而双层石墨烯 (Bilayer Graphene) 可以在两层之间产生电势差，从而打开带隙[41]。

此外，不同类型的电场调控方法也会影响二维材料的带隙。通过施加外部电场或使用铁电材料来调控二维材料的带隙是两种常用的方法。前者通过对二维材料施加外部电场来调控其带隙；后者则是将二维材料与铁电材料叠加，在电场的作用下实现对带隙的调控。研究表明，这两种方法都能够在一定程度上调控带隙，具有良好的应用前景。

总的来说，通过施加电场调控二维材料的带隙是一种有效的方法。该方法可以通过调整电场的强度和方向，以及采用不同类型的电场调控方法来实现对带隙的调控。外加电场调节比较方便，能够精确调节材料的电子结构，来达到精确地控制带隙大小的目的，进而调节材料的电子性质。与施加应力等调控方法相比，施加电场可以通过搭载电极的半导体器件、电子器件等方法进行施加，因此实现比较容易，施加条件的灵活性也很高。施加电场的效应可以用电场强度单位和材料的厚度单位表示，因此对于电场强度和厚度的测量可以实现较好的量化。缺点是必须要施加电场，一旦外加电压降为零，带隙随即消失。能够承受的电场强度有限，当电场强度达到一定程度时，电子将在材料中被强行分离，产生量子隧穿效应等不利现象。施加电场对材料的电子结构产生显著影响，这意味着在研究电场作用下的带隙调控时，需要计算材料的能带结构，增加了实验设计的难度。为了更好的实现电场对二维材料的调控，未来的研究还应该探究其他形式的电场，对二维材料带隙的调控方法，以更全面地了解二维材料的电学性质。

2.3. 原子掺杂对二维材料带隙的调控

原子掺杂是一种常用的方法，可以改变二维材料的性质。当引入外部原子时，可以改变材料的电子结构、力学和光学性质。因此，二维材料的原子掺杂对于其性质的调控具有重要的研究价值。

近年来，围绕原子掺杂对二维材料带隙调控的研究取得了很多重要的进展。首先，研究人员已经证实了掺杂对二维材料带隙的影响。例如，Li 等人使用过渡金属原子对 GaN 进行替位掺杂，结果表明，在 Sc、Y、Ti、Zr 掺杂的 GaN 体系中，带隙发生变化；其他过渡金属原子掺杂的 GaN 结构中，带隙很小甚至消失。对于 Cr 或 Rh 掺杂的 GaN，体系呈现出半金属的特性[42]。这表明，原子掺杂可以通过改变材料的能带结构来调控其导电性能。Wang 等人用 Ga、In 和 Ti 对 SnSe 中的 Sn 原子替代掺杂时，掺杂 Ga 的体系是半导体，带隙为 0.12 eV；掺杂 In 的体系是半金属，掺杂 Ti 的体系是金属。用 As、Sb 和 Bi 对 SnSe 中的 Sn 替位掺杂时，掺杂 As 的体系和掺杂 Sb 体系是半导体，带隙值分别为 0.48 eV 和 0.28 eV，掺杂 Bi 体系表现出金属性[43]。研究发现，不同的掺杂原子对二维材料带隙调控的结果是不同的，二维材料的带隙大小可增加或减小。因为不同的掺杂原子会使得材料中电子的结构发生不同的变化，进而对材料的带隙进行调控。

研究人员还发现，在不同的原子掺杂浓度下，二维材料的电子结构和性质也会发生显著的变化。Sun 等人研究了不同浓度的 Li 原子分别替位掺杂 MoSSe 中的 S 和 Se 原子。Li 掺杂 MoSSe 体系后，在禁带中间引入了杂质能级，原来的体系是直接带隙半导体，掺杂后变为间接带隙半导体，带隙大小也发生改变。当更大浓度的 Li 原子进行替位掺杂后，体系的带隙继续减小[44]。

掺杂原子对二维材料带隙的调控主要体现在：1) 带隙大小的变化：掺杂原子的引入可以改变材料的电子结构，从而影响材料的带隙大小。正如前面的所提到的研究，在 GaN 和 SnSe 中掺杂不同的原子，可以产生不同的带隙；在石墨烯中掺杂不同的原子也会使得带隙大小发生变化[45]；2) 能带类型的变化：掺杂原子类型不同，可以使掺杂体系的能带类型发生变化，实现半导体和金属的相互转换。3) 费米能级的变化：掺杂原子后可以改变材料中费米能级的位置，从而影响材料的导电性和光学性质。

近年来出现了一些新的方法来实现原子掺杂。例如，通过离子注入和等离子体处理等方法，可以在二维材料中引入大量不同种类的原子，从而进一步改变其电子性质。此外，一些研究人员还利用化学反应来控制二维材料的晶格结构和化学组成，以实现精确的控制和调节。第三，还有一些研究者将原子掺杂与其他方法结合使用，以实现更好的效果。例如，将原子掺杂与弯曲或拉伸等机械性质调节方法结合使用。这些结果表明，在利用原子掺杂过程中，有必要将其与其他材料属性紧密结合起来。总的来说，原子掺杂是一种有效地调控二维材料带隙的方法。通过改变掺杂原子的类型和数量，可以有效地调整二维材料的带隙大小和能带类型。它的调控范围广泛，可以通过掺杂浓度、种类以及掺入方式等多个方面进行调控；与外加应力和电场等方法相比，掺杂原子对材料的带隙调控效应比较稳定，且不受外界因素的影响；掺杂原子的掺入方法广泛，可以通过不同的材料制备方法实现。缺点是需要制备过程中进行掺杂，掺杂原子的浓度和掺杂位置难以控制，掺杂后对材料结构的稳定性产生很大的影响。在未来的研究可以更进一步地探究不同原子掺杂原理，研究不同掺杂方案对二维材料性质的影响，优化掺杂方法，为二维材料在电学、光学等领域中的应用提供更多选择。

2.4. 构建异质结构对二维材料的带隙调控

异质结构是指由两种不同材料按一定比例结合而成的结构。在二维材料研究中，构建异质结构是一种常用的方法，它可以有效地调控二维材料的带隙大小。通过控制界面和化学反应来调节二维材料的性质，例如在能带结构、光学性质和力学性质等方面。异质结构对二维材料的性质调控，主要体现在对其能带结构的调节上。

最近几年,关于构建异质结构对调控二维材料带隙的研究进展发展迅速。首先,研究者已经证实了异质结构对二维材料带隙的调控作用, Li 等人研究可知,石墨烯是零带隙材料, InP 是具有大带隙的半导体,当他们组合构建成异质结构时,异质结构打开 67 meV 的带隙,这使得石墨烯的零带隙结构发生了改变[46]。Zhuang 等人研究了 SnSe/GeTe 的横向异质结构,单层 SnSe 和 GeTe 都是间接带隙半导体。构建的异质结构是 type-II 型间接带隙的半导体,它们的电子性质可以通过改变异质结构的尺寸和组成比有效地调谐,当异质结构的宽度增加时,带隙的大小呈现出减小的趋势[47]。

其次,近年来出现了一些新的方法来实现异质结构的构建。例如,利用机械剥离法或化学气相沉积法可以在二维材料上构建新的异质结构。利用这些方法,研究人员可以精确地控制异质结构的尺寸和形状,进一步调节二维材料的电学和光学性能。此外,新型异质结构也被提出来对二维材料进行带隙调控。例如,研究人员提出了通过构建 2D/3D 异质结构来调控二维材料的能带结构。

综上所述,异质结构的构建对调控二维材料的带隙具有重要意义。所以通过构建异质结构,可以实现二维材料的多种物理性质,这些性质可应用到光电子学、电子学以及电化学等领域。异质结构对于二维材料来说具有重要的意义,通过构建异质结构可以实现对二维材料的精准设计和制备。因此,研究异质结构将有助于我们设计出更具有应用前景的二维材料。

总的来说,通过构建异质结构以调节二维材料的带隙大小是一种有效的方法。不同的异质结构组成方式、不同的二维材料组合方式和不同的结构参数都会影响带隙的调节效应。异质结构通过选择不同的材料形成,在很大程度上扩大了二维材料带隙调节的范围;与掺杂原子等方法相比,构建异质结构可以实现更高的调控精度,不同的异质结构可以实现不同的带隙控制。缺陷就是由于制备异质结构需要将不同的材料层分别生长再堆叠,因此需要掌握许多复杂的制备技术;异质结构需要将不同材料层堆叠在一起,因此会产生许多界面缺陷,这些缺陷可能影响异质结构中材料的性质和长期的稳定性。未来的研究可以进一步探索异质结构的带隙调节机制,寻找更理想的二维材料组合方式,以实现在电学、光学等应用领域中的应用前景。

3. 总结

Table 1. Factors and disadvantages affecting the four regulation methods

表 1. 四种调控方法的影响因素及缺点

带隙调控方法	影响因素	缺点
施加应力	应力的方向、大小	要严格考虑应变方向和大小,对材料进行处理和加工,要求很高制备工艺
施加电场	电场的大小、方向、施加电场的方式	对材料加外部电场,存在加工成本和技术难题,可承受的电场强度有限
掺杂原子	掺杂原子类型、掺杂浓度	掺杂浓度不易控制,不同的原子掺杂可能会发生相互作用,影响材料稳定性
构建异质结构	堆叠方式、组合类型	需要优化它们的结合方式和界面性质,以避免界面缺陷。异质结构对应力和低维效应敏感,需要对材料进行精细的设计

本文简要介绍二维材料带隙调控的一些方法以及相关的研究进展。通过对二维材料施加应力、施加电场、掺杂原子和构建异质结构,可以有效地调控二维材料的带隙大小和能带结构,从而改变材料各项性质,不同调控方法,有不同的影响因素和缺点,见表 1。其中,施加应力、施加电场和掺杂原子都会

对材料的稳定性产生影响。未来需要研究如何降低对材料的影响以及如何在实际应用中实现这些方法。而构建异质结构可以通过材料之间的原子层面结合来实现，且效果稳定可靠，因此在未来的研究中，异质结构的构建将成为非常有前途的二维材料带隙调控方法。未来需要进一步研究各种异质结构的构建方法、性质调控机理等方面的问题。这些方法为二维材料带隙调控提供了一种可行性和有效性的方式，未来的研究将使这些方法更加成熟，并在实践中实现更多的应用，拓展二维材料应用的范围。

致 谢

在这篇论文的完成过程中，我想要向许多人表示致谢。首先感谢我的导师，她给予了我充分的支持和指导，使我可以完成这篇文章。其次，感谢相关研究的人员，是他们的前沿的研究，让我才能更好的完成这篇文章。我还要感谢我的家人和朋友，是他们的支持和帮助，让我一往无前！

参考文献

- [1] Novoselov, K.S., Geim, A.K., *et al.* (2004) Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, **306**, 666-669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- [2] Xu, M., Liang, T., Shi, M. and Chen, H. (2013) Graphene-Like Two-Dimensional Materials. *Chemical Reviews*, **113**, 3766-3798. <https://doi.org/10.1021/cr300263a>
- [3] Vogt, P., *et al.* (2012) Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon. *Physical Review Letters*, **108**, Article ID: 155501. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.155501>
- [4] Tan, C. and Zhang, H. (2015) Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenide Nanosheet-Based Composites. *Chemical Society Reviews*, **44**, 2713-2731. <https://doi.org/10.1039/C4CS00182F>
- [5] Chhowalla, M., *et al.* (2013) The Chemistry of Two-Dimensional Layered Transition Metal Dichalcogenide Nanosheets. *Nature Chemistry*, **5**, 263-275. <https://doi.org/10.1038/nchem.1589>
- [6] Balendhran, S., Walia, S., Nili, H., Sriram, S. and Bhaskaran, M. (2015) Elemental Analogues of Graphene: Silicene, Germanene, Stanene, and Phosphorene. *Small*, **11**, 640-652. <https://doi.org/10.1002/sml.201402041>
- [7] Tan, C., *et al.* (2017) Recent Advances in Ultrathin Two-Dimensional Nanomaterials. *Chemical Reviews*, **117**, 6225-6331. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00558>
- [8] Lin, Y., Williams, T.V. and Connell, J.W. (2010) Soluble, Exfoliated Hexagonal Boron Nitride Nanosheets. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **1**, 277-283. <https://doi.org/10.1021/jz9002108>
- [9] Gupta, S.K., He, H., Banyai, D., *et al.* (2014) Effect of Si Doping on the Electronic Properties of BN Monolayer. *Nanoscale*, **6**, 5526-5531. <https://doi.org/10.1039/C4NR00159A>
- [10] Yamashita, H., Fukui, K., Misawa, S. and Yoshida, S. (1979) Optical Properties of AlN Epitaxial Thin Films in the Vacuum Ultraviolet Region. *Journal of Applied Physics*, **50**, 896-898. <https://doi.org/10.1063/1.326007>
- [11] Brunner, D., Angerer, H., Bustarret, E., *et al.* (1997) Optical Constants of Epitaxial AlGaN Films and Their Temperature Dependence. *Journal of Applied Physics*, **82**, 5090-5096. <https://doi.org/10.1063/1.366309>
- [12] Gallinat, C.S., Koblmüller, G., Brown, J.S., *et al.* (2006) In-Polar InN Grown by Plasma-Assisted Molecular Beam Epitaxy. *Applied Physics Letters*, **89**, Article ID: 032109. <https://doi.org/10.1063/1.2234274>
- [13] Ho, J.C., Specht, P., Yang, Q., *et al.* (2005) Effects of Stoichiometry on Electrical, Optical, and Structural Properties of Indium Nitride. *Journal of Applied Physics*, **98**, Article ID: 093712. <https://doi.org/10.1063/1.2130514>
- [14] Peng, Z., Chen, X., Fan, Y., Srolovitz, D.J. and Lei, D. (2020) Strain Engineering of 2D Semiconductors and Graphene: from Strain Fields to Band-Structure Tuning and Photonic Applications. *Light: Science & Applications*, **9**, Article No. 190. <https://doi.org/10.1038/s41377-020-00421-5>
- [15] Drummond, N.D., Zólyomi, V. and Fal'ko, V.I. (2012) Electrically Tunable Band Gap in Silicene. *Physical Review B*, **85**, Article ID: 075423. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.075423>
- [16] Fu, L., Wang, X. and Mi, W. (2021) Tunable Electronic Structure and Magnetic Anisotropy of Two Dimensional Mn₂CFCl/MoSSe van der Waals Heterostructures by Electric Field and Biaxial Strain. *Applied Surface Science*, **566**, Article ID: 150683. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.150683>
- [17] Wang, X., Meng, L., Li, B. and Gong, Y. (2021) Heteroatoms/Molecules to Tune the Properties of 2D Materials. *Materials Today*, **47**, 108-130. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2020.12.019>
- [18] Novoselov, K.S., Mishchenko, A., Carvalho, A. and Castro Neto, A.H. (2016) 2D Materials and van der Waals Hetero-

- structures. *Science*, **353**, Article ID: Aac9439. <https://doi.org/10.1126/science.aac9439>
- [19] Behera, H. and Mukhopadhyay, G. (2019) Effect of Strain on the Structural and Electronic Properties of Graphene-Like GaN: A DFT Study. *International Journal of Modern Physics B*, **33**, Article ID: 1950281. <https://doi.org/10.1142/S0217979219502813>
- [20] Wang, J., Khazaei, M., Arai, M., *et al.* (2017) Semimetallic Two-Dimensional TiB₁₂: Improved Stability and Electronic Properties Tunable by Biaxial Strain. *Chemistry of Materials*, **29**, 5922-5930. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.7b01433>
- [21] 郝帅帅. 应力对宽禁带二维半导体材料性质的调控[D]: [硕士学位论文]. 徐州: 中国矿业大学, 2018.
- [22] 杨聪霞. 应力和掺杂对单层 WSe₂ 电子结构和磁性的影响[D]: [硕士学位论文]. 新乡: 河南师范大学, 2018.
- [23] 陈卉, 帮少, 周少雄, 李京波. 应力调控 TiS₃ 单层材料电子性质的第一性原理研究[J]. *功能材料*, 2018, 49(10): 10065-10070.
- [24] Choi, S.-M., Jhi, S.-H. and Son, Y.-W. (2010) Controlling Energy Gap of Bilayer Graphene by Strain. *Nano Letters*, **10**, 3486-3489. <https://doi.org/10.1021/nl101617x>
- [25] 颜平兰, 李金. 平面应变对二维单层氮化镓电子性质的调控作用[J]. *湘潭大学自然科学学报*, 2017, 39(3): 14-17.
- [26] Li, J., Gui, G. and Zhong, J.X. (2008) Tunable Bandgap Structures of Two-Dimensional Boron Nitride. *Journal of Applied Physics*, **104**, Article ID: 094311. <https://doi.org/10.1063/1.3006138>
- [27] Desai, S.B., Seol, G., Kang, J.S., *et al.* (2014) Strain Induced Indirect to Direct Bandgap Transition in Multilayer WSe₂. *Nano Letters*, **14**, 4592-4597. <https://doi.org/10.1021/nl501638a>
- [28] He, K., Poole, C., Mak, K.F. and Shan, J. (2013) Experimental Demonstration of Continuous Electronic Structure Tuning via Strain in Atomically Thin MoS₂. *Nano Letters*, **13**, 2931-2936. <https://doi.org/10.1021/nl4013166>
- [29] Wang, Y.L., Cong, C.X., Yang, W.H., *et al.* (2015) Strain-Induced Direct-Indirect Bandgap Transition and Phonon Modulation in Monolayer WS₂. *Nano Research*, **8**, 2562-2572. <https://doi.org/10.1007/s12274-015-0762-6>
- [30] Niu, T.C., Meng, Q.L., Zhou, D.C., *et al.* (2020) Large-Scale Synthesis of Strain-Tunable Semiconducting Antimonene on Copper Oxide. *Advanced Materials*, **32**, Article ID: 1906873. <https://doi.org/10.1002/adma.201906873>
- [31] Li, Y., Yang, S.X. and Li, J.B. (2014) Modulation of the Electronic Properties of Ultrathin Black Phosphorus by Strain and Electrical Field. *The Journal of Physical Chemistry C*, **118**, 23970-23976. <https://doi.org/10.1021/jp506881v>
- [32] Huang, S.Y., Zhang, G.W., Fan, F.R., *et al.* (2019) Strain-Tunable van der Waals Interactions in Few-Layer Black Phosphorus. *Nature Communications*, **10**, Article No. 2447. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-10483-8>
- [33] Johari, P. and Shenoy, V.B. (2012) Tuning the Electronic Properties of Semiconducting Transition Metal Dichalcogenides by Applying Mechanical Strains. *ACS Nano*, **6**, 5449-5456. <https://doi.org/10.1021/nn301320r>
- [34] 李莎莎. 锗烯电子结构的外场调控理论研究[D]: [硕士学位论文]. 长沙: 湖南师范大学, 2019.
- [35] Xia, C., Zhang, Q., Xiao, W., *et al.* (2018) Quantum Size and Electric Field Modulations on Electronic Structures of SnS₂/BN Hetero-Multilayers. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **51**, Article ID: 215303. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aabd0c>
- [36] 潘龙飞. 半导体二维 SnS 材料在电场下的性质研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 北京理工大学, 2016.
- [37] 王昌英, 路宇畅, 任翠兰, 等. 电场、应力和电荷态对 Ti₂CO₂ 电子性质调控的理论研究[J]. *无机材料学报*, 2020, 35(1): 73-80.
- [38] 谢剑锋. 六角氮化硼片带隙调制的第一性原理研究[D]: [硕士学位论文]. 湘潭: 湘潭大学.
- [39] Liu, X. and Li, Z. (2015) Electric Field and Strain Effect on Graphene-MoS₂ Hybrid Structure: Ab Initio Calculations. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **6**, 3269-3275. <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.5b01233>
- [40] 刘贵立, 杨忠华. 变形及电场作用对石墨烯电学特性影响的第一性原理计算[J]. *物理学报*, 2018, 67(7): 192-198.
- [41] Uwann, T., Taniguchi, T., Watanabe, K. and Nagashio, K. (2018) Electrically Inert h-BN/Bilayer Graphene Interface in All-Two-Dimensional Heterostructure Field Effect Transistors. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **10**, 28780-28788. <https://doi.org/10.1021/acsami.8b08959>
- [42] 李佳斌. GaN 掺杂的电子结构与光学特性的第一性原理研究[D]: [博士学位论文]. 西安: 西安电子科技大学, 2019.
- [43] 王清霞. 掺杂原子对单层 SnSe 材料电学性质和磁学性质影响的第一性原理研究[D]: [硕士学位论文]. 郑州: 郑州大学, 2016.
- [44] 孙志远. 碱金属掺杂单层 MoSSe 和 MoSi₂N₄ 的第一性原理研究[D]: [硕士学位论文]. 荆州: 长江大学, 2022.
- [45] Denis, P.A. (2010) Band Gap Opening of Monolayer and Bilayer Graphene Doped with Aluminium, Silicon, Phos-

phorus, and Sulfur. *Chemical Physics Letters*, **492**, 251-257. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2010.04.038>

[46] 李玲霞. 二维材料异质结电子特性调控的模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 兰州: 兰州理工大学, 2022.

[47] 庄乾勇. 二维 SnSe/GeTe 异质结光电性质的第一性原理研究[D]: [硕士学位论文]. 湘潭: 湘潭大学, 2021.