

# 电场调节TMDCs及其异质结能带研究进展

高 贝, 朱 冯, 蒯家靖, 马春兰\*

苏州科技大学, 物理科学与技术学院, 江苏省微纳热流技术与能源应用重点实验室, 高性能计算中心,  
江苏 苏州

Email: \*wlxmcl@mail.usts.edu.cn

收稿日期: 2020年12月29日; 录用日期: 2021年1月29日; 发布日期: 2021年2月5日

## 摘 要

过渡金属硫化物(TMDCs)是一种受到国内外学者广泛关注的新型二维材料, 尤其是它与一些二维层状材料构成的异质结进一步拓展了其在新型光电器件领域的应用。本文综述了近几年通过第一性原理方法研究外电场对单层及双层TMDCs(MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, MoTe<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub>)、两种或者多种TMDCs组建的异质结、TMDCs与BNC型二维层状材料(g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>、g-C<sub>2</sub>N、BC<sub>3</sub>和C<sub>3</sub>N)组建的异质结、TMDCs与石墨烯组建的异质结等材料体系的能带特性的影响。研究表明适当的外电场可以有效地调控TMDCs材料及其异质结的能带结构、自旋极化以及电荷转移, 从而使得TMDCs材料及其异质结在光电器件领域有着重要的应用。

## 关键词

过渡金属硫化物, 异质结, 第一性原理, 能带, 外电场

# Research Progress of External Electric Field Regulating TMDCs and Its Heterojunction Energy Band

Bei Gao, Feng Zhu, Jiajing Kuai, Chunlan Ma\*

Jiangsu Key Laboratory of Micro and Nano Heat Fluid Flow Technology and Energy Application,  
School of Physical Science and Technology, Suzhou University of Science and Technology, Suzhou Jiangsu

Email: \*wlxmcl@mail.usts.edu.cn

Received: Dec. 29<sup>th</sup>, 2020; accepted: Jan. 29<sup>th</sup>, 2021; published: Feb. 5<sup>th</sup>, 2021

## Abstract

Transition-metal dichalcogenides (TMDCs) is one of extensive attention by international and

\*通讯作者。

domestic academics of new 2D materials, especially with heterojunctions consists of some two-dimensional layered materials to expand its application in the electronic and photonic devices fields. In this letter we review the latest research advances which the external electric fields control energy band characteristics of monolayer and bilayer TMDCs materials ( $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{MoTe}_2$ ,  $\text{WS}_2$ ), van der Waals (vdW) heterojunctions composed of multiple TMDCs materials, vdW heterojunctions composed of B, N and C type two-dimensional layered materials ( $\text{g-C}_3\text{N}_4$ ,  $\text{g-C}_2\text{N}$ ,  $\text{BC}_3$  and  $\text{C}_3\text{N}$ ) and TMDCs materials, vdW heterojunctions composed of TMDCs and graphene by the first-principles calculations. These studies suggest that the appropriate external electric field can effectively regulate the energy band, spin polarization and charge transfer of TMDCs materials and its heterojunctions which is beneficial to the application in the optical, electronic and optoelectronic field.

## Keywords

Transition-Metal Dichalcogenides, Heterojunction, Electric Field, Energy Band, First-Principles

Copyright © 2021 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

A. Geim 和 K. Novoselov [1]成功剥离石墨烯后,在全世界范围内掀起了研究者对二维材料极大的研究热潮。过渡金属硫化物(Transition-Metal Dichalcogenides, TMDCs)是继石墨烯后又一类深受研究者青睐的新型二维材料,它是指化学结构为  $\text{MX}_2$  的范德瓦尔斯型晶体,其中  $M$  为过渡金属原子,如 Mo、W、Nb、Ta 等;  $X$  为硫族原子,如 S、Se、Te 等。过渡金属硫化物可由剥离法、化学气相沉积法和水热法等方法制备,在催化、光电和电化学等领域有着广泛的应用。石墨烯零带隙的特性严重限制了它在半导体、光电等领域的应用,因此,研究人员采用各种方法打开石墨烯的能隙,其中施加垂直外电场可以破坏双层石墨烯的对称性,使双层石墨烯打开能隙,从而为石墨烯材料带来新的物理化学特性,但是在实际应用中,还是不能很好地达到所需要的能隙。然而同样地利用施加外电场的方法来调节能隙,二维过渡金属硫化物却显示出优异的电子和光学特性,并且在近几年已经取得了显著的研究进展。此外,还可以将两种几何结构相似、电子能带排列不同的材料相互作用构建成异质结来调节材料的物理化学特性。其中 TMDCs 材料相互叠加构成的异质结同样可以通过外电场来调节能带特性,为制造新型光电器件提供方向。本文综述了近几年国内外通过第一性原理方法研究外电场对单层及双层 TMDCs 材料( $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{MoTe}_2$ ,  $\text{WS}_2$ ),两种或者多种 TMDCs 材料组建的异质结以及 TMDCs 材料与 BNC 型二维层状材料( $\text{g-C}_3\text{N}_4$ ,  $\text{g-C}_2\text{N}$ ,  $\text{BC}_3$  和  $\text{C}_3\text{N}$ )构成异质结的能带特性的影响。

## 2. 电场调节单层、双层 TMDCs 材料带隙的研究进展

A. Ramasubramaniam 等人[2]基于密度泛函理论(DFT),分别研究了未加电场以及施加垂直外电场作用下  $\text{MoS}_2$ 、 $\text{MoSe}_2$ 、 $\text{MoTe}_2$ 、 $\text{WS}_2$  四种典型的双层 TMDCs 材料的电子结构特性。计算采用 VASP 软件,其中电子间的交换关联能为广义梯度近似 GGA 方法。他们发现双层  $\text{MoS}_2$ 、 $\text{MoSe}_2$ 、 $\text{MoTe}_2$ 、 $\text{WS}_2$  的能隙随着电场的增加而减小,分别在 3.0、2.5、2.0、2.7 V/nm 的正向外电场作用下减小为零。其中,虽然  $\text{MoS}_2$  在半导体-金属过渡时带隙逐渐减小,但是在误差范围内,高对称点 K 以及 K 和  $\Gamma$  点之间都存在极值,因此  $\text{MoS}_2$  不能确定间隙闭合是在 K 点还是在 K 和  $\Gamma$  点之间;  $\text{MoSe}_2$ 、 $\text{MoTe}_2$  从间接带隙转变为直接带

隙(高对称点均移动到 K 点);  $WS_2$  仍为间接带隙。他们认为施加外电场后,  $MoS_2$ 、 $MoSe_2$ 、 $MoTe_2$ 、 $WS_2$  发生半导体 - 金属的转变, 主要归因于沿着外电场方向的电荷发生局域化, 使电荷局限在原子平面上, 而使这些平面内的电荷发生离域化。研究结果表明外电场是一种可行的调节带隙的方法, 这种间隙调谐效应可以用巨斯塔克效应来解释[3], 用巨斯塔克效应系数表示带隙对外电场调控响应的灵敏度, 即带隙随外电场线性变化曲线的斜率, 它与层间间距正相关。

上述研究表明  $MoS_2$  双层结构的带隙可以被外电场调控, 但是双层  $MoS_2$  在外电场作用下并不会向直接带隙进行转变。而  $MoS_2$  单层结构本身已经是直接带隙, 在垂直外加电场作用下不仅可以大范围调谐  $MoS_2$  单分子层的波纹带隙, 并且不会对  $MoS_2$  单层膜产生影响。齐景山等人[4]为了既能调节单层  $MoS_2$  带隙值又能保留它的直接带隙特性, 构建了波纹状(类似于平整的波浪线)的单层  $MoS_2$ , 并通过第一性原理方法研究了外电场对波纹状单层  $MoS_2$  能带结构的影响。他们发现波纹状单层  $MoS_2$  的带隙值随着正向向外电场的增强而线性降低, 例如  $0.2 \text{ V/\AA}$  的外加电场使得波纹状单层  $MoS_2$  的带隙值从  $1.76 \text{ eV}$  降低至  $1.0 \text{ eV}$ , 并且仍然保留直接带隙特性。带隙值的降低可能是由于外电场导致最高占据分子轨道(HOMO)和最低未占据分子轨道(LUMO)的电荷重新分布: 波纹峰区电子能级向电场正方向移动, 谷区电子能级向电场反方向移动, 此时电子将从峰区的 HOMO 跃迁到谷区的 LUMO, 从而导致带隙降低。此外研究人员还发现波纹的曲率对带隙特性有一定的影响, 随着波纹曲率的增加带隙值降低, 并且逐渐从直接带隙转变为间接带隙。因此, 这种将外电场与二维结构波纹化相结合的方法可以有效地调控单层  $MoS_2$  的带隙特性, 有利于其在光电领域的应用。

### 3. 电场调节由 TMDCs 构成的异质结材料带隙的研究进展

除了研究单个 TMDCs 材料的特性以外, 还可以将两种或者多种几何结构相似、电子能带排布不同的材料, 通过范德瓦尔斯相互作用堆叠在一起构建成异质结来调节电子结构特性。实验上, 陈鹏等人[5]用 h-BN 封装 TMDCs 材料中的  $WS_2$ 、 $WSe_2$  以及  $MoS_2$ , 形成 h-BN/TMDCs/h-BN 范德瓦尔斯异质结。通过两个透明石墨烯电极对该异质结施加垂直外电场, 研究在外电场作用下单层和双层  $WS_2$ 、 $WSe_2$  以及  $MoS_2$  的能带变化。他们发现外电场对  $WS_2$ 、 $WSe_2$ 、 $MoS_2$  单层结构的影响可以忽略不计。而比较  $WS_2$ 、 $WSe_2$ 、 $MoS_2$  双层结构巨斯塔克效应系数(带隙随外电场线性变化曲线的斜率), 发现外电场对双层  $WSe_2$  的间接带隙可调性要大于双层  $WS_2$  和  $MoS_2$ 。他们认为带隙可调性的差异可能是因为: 1) 带隙特性与层间间距有关, 硫族元素中 Se 比 S 更重, 从而具有更大的层间距; 2) 当电荷从硫族元素转移至金属元素时, 较重的 Se 元素比 S 元素有更大电荷转移能力, 从而使得带隙对外电场的响应增加; 3) 初始边界轨道排布的差别可能导致不同程度的外电场响应。

理论上, 卢宁等人[6]针对过渡金属元素 Mo, Cr, W, 选取 TMDCs 材料中  $MoS_2$  与  $MX_2$  ( $M = Mo, Cr, W$ ;  $X = S, Se$ )构建双层异质结  $MX_2/MoS_2$ , 研究发现在这五种双层异质结中除了  $WSe_2/MoS_2$  表现为直接带隙, 其余均为间接带隙半导体。并且他们通过第一性原理计算研究了这些双层异质结在垂直正向向外电场  $0\sim 0.6 \text{ V/\AA}$  作用下的带隙特性。在垂直正向向外电场的作用下, 这些异质结的带隙值均有降低, 其中双层异质结  $CrSe_2/MoS_2$ 、 $MoSe_2/MoS_2$  的自旋极化特性增强, 从而导致材料由间接带隙转变为直接带隙;  $WS_2/MoS_2$  和  $CrS_2/MoS_2$  在电场升高到  $0.6 \text{ V/\AA}$  时仍为间接带隙; 而  $WSe_2/MoS_2$  始终保持直接带隙的特性。研究表明外电场不仅可以调控双层 TMDCs 异质结的带隙, 而且会引起半导体间接 - 直接带隙的转变, 有利于在光电领域的应用。此外, 薛小平等人[7]针对过渡金属元素 Ta, 构建了范德瓦尔斯异质结  $TaS_2/TaSe_2$  和  $TaSe_2/TaTe_2$ , 他们发现由于 Ta 元素的 d 轨道穿过费米能级, 这两种异质结都呈金属性。同样他们通过第一性原理计算研究了这两种异质结在外电场  $-0.5$  到  $0.5 \text{ V/\AA}$  作用下的带隙特性。在外电场的作用下, 异质结  $TaS_2/TaSe_2$  的带隙并未发生太大改变, 但是在负向外电场  $-0.1 \text{ V/\AA}$  下出现自旋劈裂特

性, 并且自旋劈裂随负向外电场的增大而逐渐减小; 相反, 当正向外电场从 0.1 增大到 0.3 V/Å 时, 自旋劈裂缓慢增加。而异质结 TaSe<sub>2</sub>/TaTe<sub>2</sub> 在外电场作用下带隙发生改变, 从金属转变为 0.69 eV 间接带隙的半导体(0.3 V/Å 电场下)。说明外电场可以有效地调控异质结的带隙特性和自旋特性, 为纳米电子器件的研制提供更有意义的依据。

除了上述两种或者多种过渡金属硫化物构成的异质结, 过渡金属硫化物与由 BNC 组成的二维层状纳米材料也可以构成异质结, 并且这类异质结具有优异的物理化学特性。例如二维石墨相氮化碳(g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) 具有良好的化学稳定性和光催化性能, 可用于 H<sub>2</sub>O 分解制 H<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub> 以及降解有机污染物。但是 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 的可见光响应范围较窄, 光吸收系数较低, 光生电子-空穴对分离能力较弱, 这些缺点极大地阻碍了光催化性能的提高。通过浸渍和煅烧等方法, MoS<sub>2</sub>/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>、g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/WS<sub>2</sub> 等二维异质结成功合成[8], 结合罗丹明(RHB)和甲基橙(MO)的光降解机制, 表明二维异质结可以有效地增强可见光活性, 同时它的电子性质和光学性质要优于单层结构。叶嘉欣等人[9]发现异质结 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/WSe<sub>2</sub> 具有 1.395 eV 的直接带隙(不考虑自旋轨道耦合), 要低于 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 单分子层的带隙值 2.118 eV 和 WSe<sub>2</sub> 单分子层的带隙值 1.544 eV, 且紫外可见光利用率高于两个单分子层, 但是 I 型的能带排布阻碍了光生电子-空穴对的有效分离, 导致了电子与空穴的高复合率。因此他们通过施加-0.6 到 0.6 V/Å 的垂直外电场调控异质结 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/WSe<sub>2</sub> 的带隙特性。在电场调控研究中发现, 高于 0.4 V/Å 以及低于-0.4 V/Å 的电场可以实现 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/WSe<sub>2</sub> 异质结带隙值的降低, 并且能带排列从 I 型向 II 型过渡, 可以有效地实现光生电子-空穴对的分离。另外, 他们发现在正向外电场作用下, WSe<sub>2</sub> 和 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 层分别有电子耗竭和电子积聚的趋势, 而 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/WSe<sub>2</sub> 异质结的界面区电子从 WSe<sub>2</sub> 层向 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 层的转移明显增加; 相反, 在负向外电场作用下, g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/WSe<sub>2</sub> 异质结的界面区电子从 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 层向 WSe<sub>2</sub> 层的转移明显增加, 说明外电场还可以有效地调节 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/WSe<sub>2</sub> 异质结层间耦合和电荷转移。

一种新型的类石墨烯 g-C<sub>2</sub>N 具有 sp<sup>2</sup> 特性, 带隙为 1.66 eV。实验上通过化学沉积法已经成功合成异质结 g-C<sub>2</sub>N/XSe<sub>2</sub> (X = Mo, W) [10], 理论上 Z. D. Zheng 等人[11]将 5 × 5 × 1 扩胞后的 XSe<sub>2</sub> (X = Mo, W) 与 2 × 2 × 1 扩胞后的 g-C<sub>2</sub>N 建立异质结, 晶格失配分别低至 1.3%、1.5%, 研究了外电场对异质结 g-C<sub>2</sub>N/XSe<sub>2</sub> (X = Mo, W) 电子结构的影响。异质结 g-C<sub>2</sub>N/MoSe<sub>2</sub> 在-0.1、0、0.1、0.2、0.3 V/Å 的外电场下始终表现为间接带隙特性, 并且带隙值随外电场的正向增大而线性降低, 分别为 0.66、0.54、0.45、0.39、0.34 eV。而异质结 g-C<sub>2</sub>N/WSe<sub>2</sub> 在-0.1、0、0.1、0.2、0.3 V/Å 的外电场下带隙分别为 0.32、0.26、0.19、0.12、0.06 eV, 其中在-0.1、0 V/Å 的电场下表现为间接带隙; 而在 0.1~0.3 V/Å 的电场作用下, 价带穿过费米能级, 异质结表现为 p 型半导体。这两种异质结在费米能级附近的导带主要来源于单层 g-C<sub>2</sub>N, 而价带主要来源于过渡金属硫化物 XSe<sub>2</sub> (X = Mo, W)。

A. Bafekry 等人[12]选取了化学计量比的 BC<sub>3</sub> 和 C<sub>3</sub>N 以及 C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 这三种二维层状纳米材料, 与二维过渡金属硫化物 MoS<sub>2</sub> 通过范德瓦尔斯相互作用构建了异质结 MoS<sub>2</sub>/BC<sub>3</sub>、MoS<sub>2</sub>/C<sub>3</sub>N 和 MoS<sub>2</sub>/C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, 发现异质结 MoS<sub>2</sub>/BC<sub>3</sub> 和 MoS<sub>2</sub>/C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 属于直接带隙半导体, 带隙值分别为 0.4、1.74 eV, 而 MoS<sub>2</sub>/C<sub>3</sub>N 导带与价带杂糅在一起, 表现为金属特性。并且他们通过第一性原理计算研究了异质结 MoS<sub>2</sub>/BC<sub>3</sub>、MoS<sub>2</sub>/C<sub>3</sub>N 和 MoS<sub>2</sub>/C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 在垂直外电场-1.0 到 1.0 V/Å 作用下的带隙特性。研究结果发现随着正向、负向外电场的增加, MoS<sub>2</sub>/BC<sub>3</sub> 的带隙显著减小, 当外电场增大到+0.4 V/Å 和-0.6 V/Å 时 MoS<sub>2</sub>/BC<sub>3</sub> 发生半导体-金属的转变; 同样 MoS<sub>2</sub>/C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 的带隙值也随着外电场的增加而减小, 当外电场大于+1.0V/Å 和-1.0 V/Å 时 MoS<sub>2</sub>/C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 发生半导体-金属的转变; 不同的是对金属异质结 MoS<sub>2</sub>/C<sub>3</sub>N 施加负向外电场能够打开带隙, 当外电场增加为-0.8 V/Å 时带隙增大为 0.42 eV, 并且外电场在-0.8 到-1.2 V/Å 之间带隙值始终保持为 0.42 eV。因此, 外电场可以有效地调控过渡金属硫化物与由 BNC 组成的二维层状材料构成异质结的带隙特性, 从而可以有效地应用于纳米电子、自旋电子和光电器件。

当然, 过渡金属硫化物与石墨烯等经典的二维材料也可以构成异质结, 例如  $\text{Ga}_2\text{SSe}$  作为一种新型的二维材料, 具有较大的 Rashba 自旋劈裂特性和面内压电特性, 在自旋电子学和电子学领域具有广阔的应用前景。最近 Hong T. T. Nguyen 等人[13]计算研究了金属/半导体异质结中石墨烯/ $\text{Ga}_2\text{SSe}$  在垂直外电场  $-0.3$  到  $0.3 \text{ V/\AA}$  作用下的带隙特性。研究表明, 随着负向外电场的增加, 费米能级靠近价带, 逐渐形成 P 型肖特基接触; 随着正向外电场的增加, 费米能级靠近导带, 逐渐形成 N 型肖特基接触, 有利于在高电子和光学性能的可控肖特基纳米器件上的应用。

#### 4. 总结与展望

以上的研究表明外电场是一种可行的调节带隙的方法。通过施加垂直外电场可以有效地调控双层 TMDCs 材料( $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{MoTe}_2$ ,  $\text{WS}_2$ )的带隙特性, 施加外电场后双层  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{MoTe}_2$ ,  $\text{WS}_2$  能隙逐渐减小, 并且发生半导体-金属的转变, 主要归因于沿着外电场方向的电荷发生局域化, 使电荷局限在原子平面上, 而使这些平面内的电荷发生离域化。而外电场并不能有效地调节单层 TMDCs 材料的带隙, 例如单层  $\text{MoS}_2$ , 但是可以将其二维结构波纹化, 再施加垂直正向外电场既可以降低单层  $\text{MoS}_2$  的带隙值又能保留它的直接带隙特性, 这种外电场与二维结构波纹化相结合的思路可以延伸到整个单层 TMDCs 材料。此外将两种及以上几何结构相似、电子能带排列不同的材料(两种或者多种过渡金属硫化物, 过渡金属硫化物与由 BNC 组成的二维层状纳米材料( $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 、 $g\text{-C}_2\text{N}$ 、 $\text{BC}_3$  和  $\text{C}_3\text{N}$ ), 过渡金属硫化物与石墨烯)通过范德瓦尔斯相互作用堆叠在一起构建成异质结可以有效地调控 TMDCs 材料的带隙特性。另外对这些异质结再施加外电场, 可以继续有效地调控异质结的带隙特性和自旋特性, 为制造新型光电器件提供了方向。

#### 基金项目

感谢国家自然科学基金(批准号: 11304218), 江苏省高等学校自然科学研究重大项目(批准号: 17KJA140001), 江苏省“六大人才高峰”(批准号: XCL-078), 江苏省研究生科研与实践创新计划项目(批准号: KYCX20\_2749、KYCX18\_2550), 江苏省十三五重点学科(批准号: 20168765)的支持。

#### 参考文献

- [1] Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., Grigorieva, I.V. and Firsov, A.A. (2004) Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, **306**, 666-669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- [2] Ramasubramaniam, A., Naveh, D. and Towe, E. (2011) Tunable Band Gaps in Bilayer Transition-Metal Dichalcogenides. *Physical Review B*, **84**, Article No. 205325. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.205325>
- [3] Khoo, K.H., Mazzoni, M.S.C. and Louie, S.G. (2004) Tuning the Electronic Properties of Boron Nitride Nanotubes with Transverse Electric Fields: A Giant DC Stark Effect, *Physical Review B*, **69**, Article No. 201401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.201401>
- [4] Qi, J., Li, X., Qian, X. and Feng, J. (2013) Bandgap Engineering of Rippled  $\text{MoS}_2$  Monolayer under External Electric Field. *Applied Physics Letters*, **102**, Article No. 173112. <https://doi.org/10.1063/1.4803803>
- [5] Chen, P., Cheng, C., Shen, C., Zhang, J., Wu, S., Lu, X.B., Wang, S.P., Du, L.J., Watanabe, K.J., Taniguchi, T., Sun, J.T., Yang, R., Shi, D.X., Liu, K.H., Meng, S. and Zhang, G.Y. (2019) Band Evolution of Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides under Electric Fields. *Applied Physics Letters*, **115**, Article No. 083104. <https://doi.org/10.1063/1.5093055>
- [6] Lu, N., Guo, H., Li, L., Dai, J., Wang, L., Mei, W.N., Wu, X.J. and Zeng, X.C. (2014)  $\text{MoS}_2/\text{MX}_2$  Heterobilayers: Bandgap Engineering via Tensile Strain or External Electrical Field. *Nanoscale*, **6**, 2879-2886. <https://doi.org/10.1039/C3NR06072A>
- [7] Xue, X., Wang, X. and Mi, W. (2018) Electric Field Effects on Electronic Structure of Tantalum Dichalcogenides van der Waals  $\text{TaS}_2/\text{TaSe}_2$  and  $\text{TaSe}_2/\text{TaTe}_2$  Heterostructures. *Applied Surface Science*, **455**, 963-969.

- 
- <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.06.004>
- [8] Li, J., Liu, E.Z., Ma, Y.N., Hu, X.Y., Wan, J., Sun, L. and Fan, J. (2016) Synthesis of MoS<sub>2</sub>/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> Nanosheets as 2D Heterojunction Photocatalysts with Enhanced Visible Light Activity. *Applied Surface Science*, **364**, 694-702. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.12.236>
- [9] Ye, J., Liu, J. and An, Y. (2020) Electric Field and Strain Effects on the Electronic and Optical Properties of gC<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/WSe<sub>2</sub> van der Waals Heterostructure. *Applied Surface Science*, **501**, Article No. 144262. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.144262>
- [10] Gong, Y., Lin, J., Wang, X., Shi, G., Lei, S. and Lin, Z. (2014) Vertical and In-Plane heterostructures from WS<sub>2</sub>/MoS<sub>2</sub> Monolayers. *Nature Materials*, **13**, 1135-1142. <https://doi.org/10.1038/nmat4091>
- [11] Zheng, Z., Wang, X. and Mi, W. (2017) Electric Field Tunable Electronic Structure in Two-Dimensional van der Waals g-C<sub>2</sub>N/XSe<sub>2</sub> (X = Mo, W) Heterostructures. *Carbon*, **117**, 393-398. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.03.018>
- [12] Bafekry, A., Stampfl, C. and Ghergherehchi, M. (2020) Strain, Electric-Field and Functionalization Induced Widely Tunable Electronic Properties in MoS<sub>2</sub>/BC<sub>3</sub>, /C<sub>3</sub>N and /C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> van der Waals Heterostructures. *Nanotechnology*, **31**, Article No. 295202. <https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab884e>
- [13] Nguyen, H.T.T., Obeid, M.M., Bafekry, A., Idrees, M., Vut, V., Phuc, H.V., Hieun, N., Hoa, L., T., Amin, B. and Nguyen, C.V. (2020) Interfacial Characteristics, Schottky Contact, and Optical Performance of a Graphene/Ga<sub>2</sub>SSe van der Waals Heterostructure: Strain Engineering and Electric Field Tunability. *Physical Review B*, **102**, Article No. 075414. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.075414>