第 48 卷第 4 期
2020 年 4 月

硅 酸 盐 学 报
JOURNAL OF THE CHINESE CERAMIC SOCIETY

Vol. 48，No. 4
April，2020

http://www.gxyb.cbpt.cnki.net

DOI：10.14062/j.issn.0454-5648.20190422

电场和应变对砷烯/WS_2 van der Waals 异质结电子结构的影响

李 伟[1]，戴宪起[2]，张 芳[3]

(1. 河南城建学院数理学院，河南 平顶山 467036；2. 河南师范大学物理与材料科学学院，河南 新乡 453007；
3. 平顶山学院电气与机械工程学院，河南 平顶山 467000)

摘 要：采用基于密度泛函理论的第一性原理计算，研究了砷烯/WS_2 van der Waals 异质结的稳定性和电子结构，同时考虑了电场和应变效应。计算结果表明：砷烯/WS_2 异质结为Ⅱ型能带排列，具有间接带隙。外电场不仅可以调节异质结的带隙宽度而且可以导致异质结由Ⅱ型能带排列转变为Ⅰ型能带排列。应变可以有效调节异质结的带隙宽度，但是不能导致能带排列类型的转变，异质结始终为Ⅱ型能带排列。

关键词：能带排列；外电场；应变；带隙；砷烯/二硫化钨 van der Waals 异质结
中图分类号：O469　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2020)04–0499–08
网络出版时间：2020–01–14

Influences of Electric Field and Strain on Electronic Structures of Arsenene/WS_2 van der Waals Heterostructure

LI Wei[1], *DAI Xianqi*[2], *ZHANG Fang*[3]
(1. School of Mathematics & Physics, Henan University of Urban Construction, Pingdingshan 467036, Henan, China;
2. College of Physics and Materials Science, Henan Normal University, Xinxiang 453007, Henan, China;
3. College of Electric and Mechanical Engineering, Pingdingshan University, Pingdingshan, 467000, Henan, China)

Abstract: The stability and electronic structures of the arsenene/WS_2 van der Waals heterostructure at different electrical field intensities and strains were investigated *via* the first-principles calculation based on the density functional theory. The calculation results show that the arsenene/WS_2 heterostructure possesses a type-II band alignment and an indirect band gap. Moreover, the external electrical field modulates the band gap and brings the band alignment transition from type-II to type-I in the heterostructure. In addition, the band gap can be effectively tuned by the strain, while the type-II band alignment is robust under the strain.

Keywords: band alignment; external electric field; strain; band gap; arsenene/tungsten disulfide van der Waals heterostructure

近几年，成功应用于场效应管和光电探测器领域的过渡金属硫族化合物、磷烯和锡烯等二维材料被陆续发现[6–9]。最近，一种新型的第五主族单元素二维材料——砷烯(arsenene)引起了物理、化学、材料、电子等领域研究人员的关注[10–13]。砷烯具有类似磷烯的独特二维层状结构，它具有高迁移率[10^4 $cm^2/(V·s)$]、适中的带隙宽度(1.66 eV)和良好的可见光/紫外线吸收能力，施加应变后其能带可由间接带隙转变为直接带隙，是制作光伏器件的理想材料[13–15]。研究表明，在砷烯的锯齿形纳米带中，拉伸应变使空穴的有效质量变大，而压缩应变则使空穴的有效质量变小，对砷烯表面进行卤化或沿砷烯的不同方向(zigzag 方向或 armchair 方向)施加应变在 k 点会出现 Dirac 锥[16–19]。对砷烯的表面进行氢化或在其表面吸附原子后，砷烯对外会显示磁性[20–21]。

收稿日期：2019–06–24。　修订日期：2019–09–22。
基金项目：国家自然科学基金 (61674053，U1704136)；河南省科技攻关项目(182102210222)。
第一作者：李 伟(1980—)，男，博士，讲师。
通信作者：张 芳(1978—)，女，硕士，副教授。

Received date: 2019–06–24.　**Revised date:** 2019–09–22.
First author: LI Wei (1980–), male, Ph.D., Lecturer.
E-mail: liwei19801210@126.com
Correspondent author: ZHANG Fang (1978–), female, Master, Associate Professor.
E-mail: zhangfang2003@163.com

然而本征二维材料的固有性能难以满足实际应用的需求，比如石墨烯的零带隙限制了其在晶体管领域的应用[22–23]。为了拓展二维材料在光电子和纳电子器件领域的应用，人们采用了多种方法来调控本征二维材料的性能[24–29]。Van der Waals 异质结是调控二维材料性能最常用的方法，van der Waals 异质结不仅能够综合不同二维材料的优点，而且由于二维材料表面没有悬挂键，使得 van der Waals 异质结界面处不需要满足晶格匹配条件。因此，构建基于二维材料的 van der Waals 异质结被认为是突破本征二维材料局限性、获得新奇光电特性的有效方法。

为此，选用单层 WS_2 作为基底与砷烯构建了 van der Waals 异质结，选用 WS_2 作为基底原因有：1) 单层 WS_2 具有与砷烯相似的六角晶格；2) 基于砷烯的 van der Waals 异质结虽然已有报道[30]，但鲜见砷烯和 WS_2 组成的异质结的研究报道。对于半导体性的 van der Waals 异质结，其能带排列分为 3 类：即Ⅰ型(straddling gap)、Ⅱ型(staggered gap)和Ⅲ型(broken gap)，能带排列类型决定了异质结的应用领域。由于超快的电子空穴复合，Ⅰ型能带排列主要应用于发光二极管领域；Ⅱ型能带排列导致了自发的电子空穴分离，是制造光伏器件的理想材料；Ⅲ型能带排列广泛应用于构建隧穿场效应管。任一种 van der Waals 异质结必属于其中的一类，这限制了其在多功能器件领域的应用。本工作通过第一性原理计算，研究了砷烯/WS_2 van der Waals 异质结的稳定性和电子结构，探索了电场和应变对异质结能带排列的影响，分析了导致能带排列变化的内在原因。

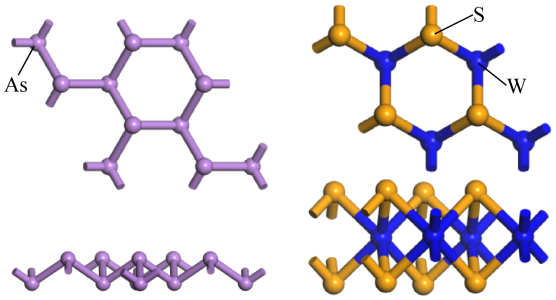
1 计算方法

采用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理方法，使用的软件包是 Vienna Ab-initio simulation package (VASP)[31–32]。原子实和价电子之间的相互作用通过缀加投影波方法(projector-augmented wave method，PAW)赝势来描述[32]。计算中采用广义梯度近似(GGA)下的交换关联泛函(PBE)，同时还考虑了自旋轨道耦合效应，采用 DFT-D2 方法[33–34]对层与层之间的 van der Waals 作用做了修正。平面波截断能取为 500 eV，所有结构均弛豫至原子间相互作用力小于 0.1 eV/nm，能量收敛标准为 1×10^{-5} eV/atom。Brillouin 区的积分采用 Monkhorst-Pack 方法，k 点网格数为 11×11×1。为避免周期性边界相互作用，z 轴方向上采用 2 nm 以上的真空层。

2 结果与讨论

2.1 砷烯/WS_2 异质结的几何结构和稳定性

为了构建砷烯/WS_2 van der Waals 异质结，首先计算了砷烯和单层 WS_2 的几何结构参数。计算结果表明，砷烯具有褶皱的六角蜂巢结构，晶格常数为 0.375 9 nm，褶皱高度为 0.139 2 nm。单层 WS_2 由 3 个原子层(S–W–S)堆叠而成，1 层具有蜂窝状六角排列的 W 原子被夹在 2 层同样具有六角排列的 S 原子中间，其晶格常数为 0.317 6 nm，如图 1 所示。上述计算结果与其他研究报道相吻合[35–37]。



Purple, orange and blue balls are for As, S and W atoms, respectively.

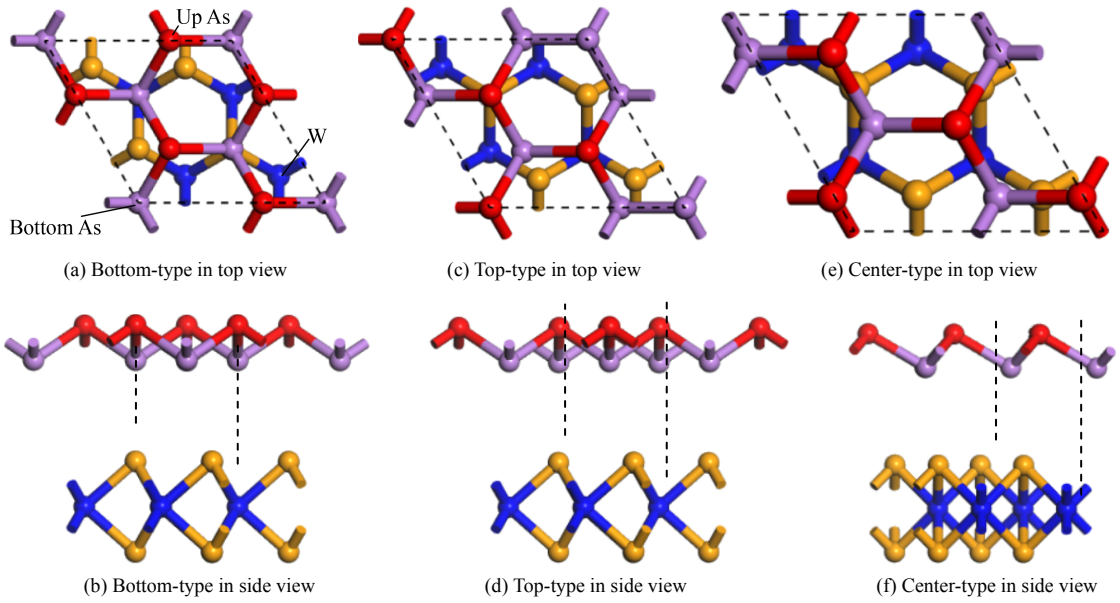
图 1 砷烯和单层 WS_2 的几何结构

Fig. 1 Geometrical structures of arsenene (As) and monolayer WS_2

采用 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 砷烯超原胞和 2×2 WS_2 超原胞构建砷烯/WS_2 van der Waals 异质结，两者的晶格失配度仅为 2.5%，晶格失配引起的应变对异质结的电子结构几乎没有影响。如图 2 所示，砷烯/WS_2 异质结有 3 种堆垛构型，分别为底部、顶部和中心构型。为了定量比较 3 种构型的稳定性，分别采用公式(1)计算了 3 种构型的形成能(E_b)：

$$E_b = E_{As/W} - E_{As} - E_W \quad (1)$$

其中：$E_{As/W}$、E_{As} 和 E_W 分别为异质结、砷烯和单层 WS_2 的总能。3 种构型优化后的晶格结构参数如表 1 所示。由表 1 可以看出，3 种构型的形成能均为负值，这意味着 3 种构型从能量角度来看都是稳定的。3 种构型形成能的大小顺序为：顶部>底部>中心，这表明顶部构型是最稳定的构型。同时，顶部构型的层间距是最小的，砷烯和 WS_2 单层间有最强的相互作用，这导致了顶部构型的形成能最大，晶格结构最稳定。因此只讨论异质结的顶部构型。



(a) Bottom-type in top view　(c) Top-type in top view　(e) Center-type in top view

(b) Bottom-type in side view　(d) Top-type in side view　(f) Center-type in side view

Red, purple, orange and blue balls represent up As, bottom As, S and W atoms, respectively.

图 2　砷烯/WS_2 异质结的顶视和侧视图

Fig. 2　Top view and side view of the arsenene/WS_2 heterostructure

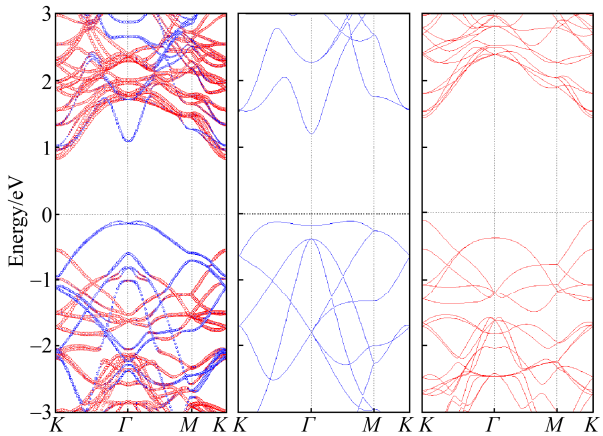
表 1　3 种堆垛构型下砷烯/WS_2 异质结的层间距(D)和束缚能(E_b)

Table 1　Interlayer distance D and the binding energy E_b of arsenene/WS_2 heterostructures for three stacking configurations

Stacking configuration	D/nm	E_b/meV
Bottom	0.330 6	–746.126
Top	0.327 9	–751.196
Center	0.332 3	–743.926

2.2　砷烯/WS_2 异质结的电子结构

图 3 是砷烯和单层 WS_2 的能带结构以及砷烯/WS_2 异质结的投影能带结构。由图 3b 可以看出，砷烯的导带底位于 Γ 点，价带顶位于 Γ 点和 M 点之间，这表明砷烯为间接带隙，带隙宽度为 1.323 eV。由图 3c 可以看出，单层 WS_2 的价带顶和导带底均位于 K 点，单层 WS_2 为直接带隙半导体，由于考虑了自旋轨道耦合效应，在 WS_2 的导带底出现了宽度为 29.8 meV 的劈裂，价带顶出现了宽度为 430 meV 的劈裂，其带隙宽度为 1.55 eV，与不考虑自旋轨道耦合效应时相比，单层 WS_2 带隙宽度变小了。图 3a 为砷烯/WS_2 异质结的投影能带图。异质结的能带近似等于单层 WS_2 和砷烯各自能带的简单叠加，异质结中的 WS_2 和砷烯的能带形状与各自独立存在时的能带形状相比几乎没有变化，这是由于层间为微弱的 van der Waals 作用。在考虑自旋轨道耦合效应后，异质结的导带底出现了宽度为 23.1 meV 的劈裂，价带顶出现了宽度为 41.8 meV 的劈裂，同样由于导带底和价带顶的劈裂，异质结的带隙宽度与不考虑自旋轨道耦合效应时相比也变小了。虽然自旋轨道耦合效应使单层 WS_2 和砷烯的能带发生了劈裂，进而导致两者的带隙宽度减小，但是能带的形状和性质与施加自旋轨道耦合效应前相比并没有发生改变，并且异质结的带隙宽度只是略微减小。这表明自旋轨道耦合效应对异质结的能带结构影响很小，因此在下面的计算中将不再考虑自旋轨道耦合效应。异



(a) Arsenene/WS_2 heterostructure　(b) Arsenene　(c) Monolayer WS_2

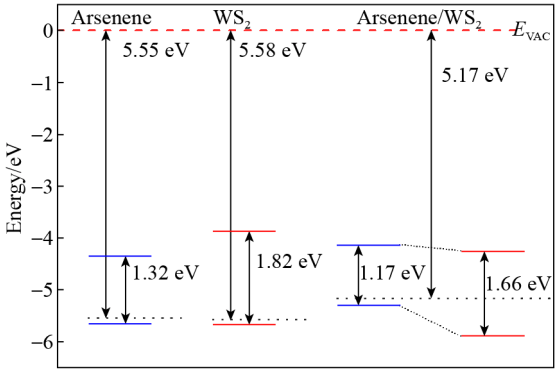
Projection to arsenene layer is denoted by blue lines and to WS_2 by red lines. The Fermi level is set to zero.

图 3　投影能带结构图

Fig. 3　Projected band structure

质结的导带底为 WS_2 的贡献，价带顶为砷烯的贡献，因此砷烯/WS_2 异质结为 II 型异质结，电子和空穴可以自发分离，是制作太阳能电池的理想材料。

能带排列对基于砷烯/WS_2 异质结制作的器件性能影响很大，图 4 是砷烯/WS_2 异质结的能带排列。由图 4 可以看出，在异质结中砷烯的导带底和价带顶均高于 WS_2 的导带底和价带顶，这表明砷烯/WS_2 异质结为第 II 类能带排列。砷烯、WS_2 和砷烯/WS_2 异质结的功函数分别为 5.55、5.58 和 5.17 eV。由于砷烯的功函数小于 WS_2 的功函数，当砷烯和单层 WS_2 堆垛形成异质结时电子就会由 Fermi 能级高的砷烯向 Fermi 能级低的 WS_2 转移，而空穴则由 WS_2 向砷烯转移。最终砷烯和 WS_2 的 Fermi 能级变为相等，电子不再流动。由于电子的转移，砷烯层聚集了正电荷而 WS_2 层聚集了负电荷，异质结中形成了内建电场，电场方向由砷烯指向 WS_2。内建电场促进了电子–空穴对的分离，阻碍了电子和空穴的复合，大大延长了载流子的寿命，这进一步证明砷烯/WS_2 异质结是制作太阳能电池的理想材料。



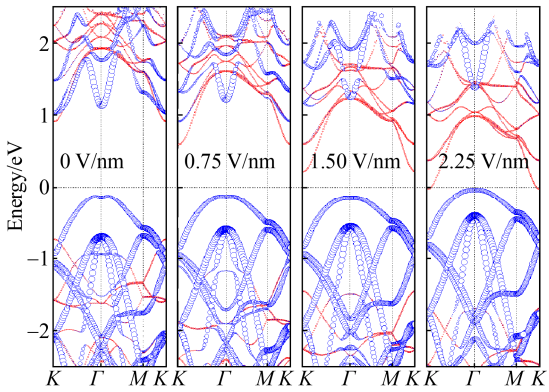
The vacuum level (E_{vac}) is set to zero. The red and black dashed lines represent for E_{vac} and the Fermi level, respectively.

图 4 砷烯、单层 WS_2 和砷烯/WS_2 异质结的能带排列图

Fig. 4 Band alignments of arsenene, monolayer WS_2 and the arsenene/WS_2 heterostructure

2.3 外电场对砷烯/WS_2 异质结电子结构的影响

在实验上，电场是调控异质结电子结构的有效方法，因此外加了垂直于砷烯/WS_2 异质结平面的电场，规定电场的正方向由砷烯指向 WS_2，正负 2 个方向外电场均由 0 V/nm 持续增加到 4.00 V/nm。图 5 是施加不同外电场时砷烯/WS_2 异质结的投影能带。由图 5 可以看出，随着外电场的增加，异质结的带隙宽度逐渐减小最终变为零。没有施加外电场时，异质结为间接带隙半导体，导带底位于 K 点，价带顶位于 Γ 点和 M 点之间。对异质结施加外电场后，导带底快速下降而价带顶缓慢上升，最终外电场增加到 2.25 V/nm 时异质结由半导体转变为金属。



Projection to arsenene layer is denoted by blue thick lines and to WS_2 by red thin lines. The Fermi level is set to zero.

图 5 施加不同外电场时砷烯/WS_2 异质结的投影能带

Fig. 5 Projected band structures of the arsenene/WS_2 heterostructure under different external electric fields

为了进一步研究外电场对带隙宽度的影响，图 6 是砷烯、单层 WS_2 和砷烯/WS_2 异质结的带隙宽度随外电场的变化关系。如图 6 所示，对砷烯和单层 WS_2 施加外电场后，砷烯和单层 WS_2 的带隙宽度没有发生变化，外电场不能调控单层二维材料的带隙宽度。由图 6 可以看出，砷烯/WS_2 异质结的带隙宽度不仅与外电场的大小有关，而且与外电场的方向有关。对异质结施加正方向的外电场时，带隙宽度随外电场的增加线性减小，最终外电场增加到 2.25 V/nm 时异质结由半导体转变为金属。施加负方向的外电场时，带隙宽度先增加然后单调减小，最终在–3.30 V/nm 时带隙宽度变为 0。带隙宽度随正负电场的变化关系不同，其原因在于异质结中存在与正外电场方向相同的内建电场。施加正外电场时，由于正外电场与内建电场方向相同，异质结中的电场单调增加导致带隙宽度线性减小。施加负外电场时，由于外电场与内建电场方向相反，外电场抵消了部分内建电场，异质结中的电场变小，故带隙宽度首先增加。当负外电场达到–0.25 V/nm 时，外电场完全抵消了内建电场，异质结中的电场变为 0，带隙宽度达到最大。随着负外电场的进一步增大，异质结的带隙宽度持续减小。

为了揭示外电场调控砷烯/WS_2 异质结电子结构的物理机理，图 7 是异质结的导带底和价带顶随外电场的变化关系。由图 7 可以看出，当外电场位于–0.38~2.25 V/nm 之间时，异质结的导带底为 WS_2

的贡献，而价带顶为砷烯的贡献，因此砷烯/WS_2异质结为第Ⅱ类能带排列。当对异质结施加负外电场时，砷烯的导带底和价带顶随着外电场的增加持续下降，而 WS_2的导带底和价带顶则持续上升。当负外电场的数值大于 0.38 V/nm 时，砷烯的导带底向下移动到了 WS_2导带底的下面，而砷烯的价带顶依然位于 WS_2价带顶的上面，此时异质结的导带底和价带顶均为砷烯的贡献，异质结由第Ⅱ类能带排列转变为第Ⅰ类能带排列。随着负外电场的增加，WS_2的价带顶持续上升，砷烯的导带底持续下降，当负外电场的数值大于 0.95 V/nm 时，异质结的导带底

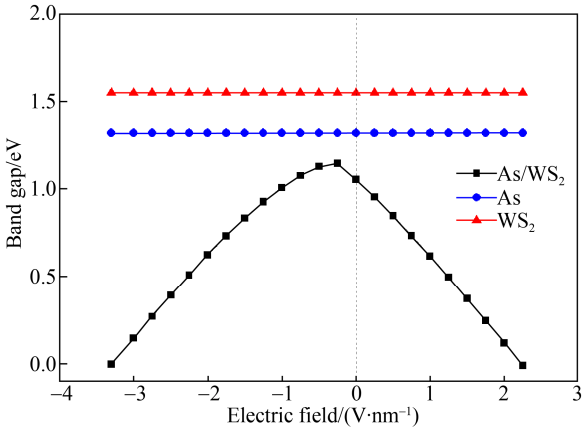
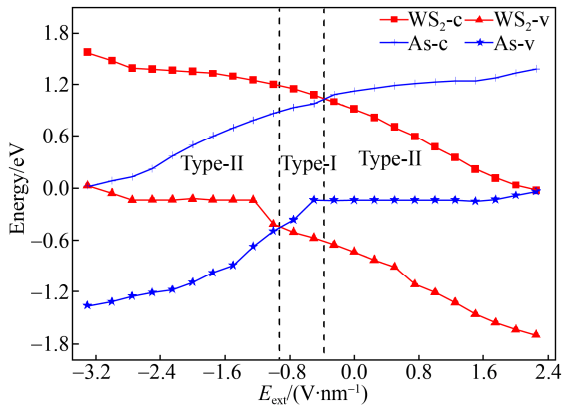


图 6　砷烯、单层 WS_2和砷烯/WS_2异质结的带隙宽度随外电场的变化关系

Fig. 6　Evolution of the band gap of arsenene, monolayer WS_2 and the arsenene/WS_2 heterostructure with the external electric field



WS_2-c, As-c and WS_2-c, As-v are the conduction band minimum and valence band maximum of WS_2 and arsenene in the arsenene/WS_2 heterostructure respectively; E_{ext} is external electric field.

图 7　砷烯和WS_2异质结的导带底和价带顶随外电场的变化关系

Fig. 7　Evolution of the conduction band minimum and valence band maximum of the arsenene and WS_2 heterostructure with the external electric field

和价带顶分别为砷烯和 WS_2的贡献，异质结又转变为了第Ⅱ类能带排列。以上研究表明，外电场能够有效调控砷烯/WS_2异质结的能带排列类型，为制造多功能光电子器件提供了一种有效方法。

外电场会促进砷烯层和 WS_2 层之间的电荷转移，从而改变砷烯/WS_2异质结的电子性质。为了深入理解砷烯层和 WS_2层之间的电荷转移机理，计算了在不同外电场作用下砷烯/WS_2异质结沿 Z 方向的差分电荷密度。差分电荷密度(Δρ)由公式(2)给出：

$$\Delta\rho(z)=\int\rho_{S}(x,y,z)\mathrm{d}x\mathrm{d}y-\int\rho_{WS_2}(x,y,z)\mathrm{d}x\mathrm{d}y-\int\rho_{As}(x,y,z)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{2}$$

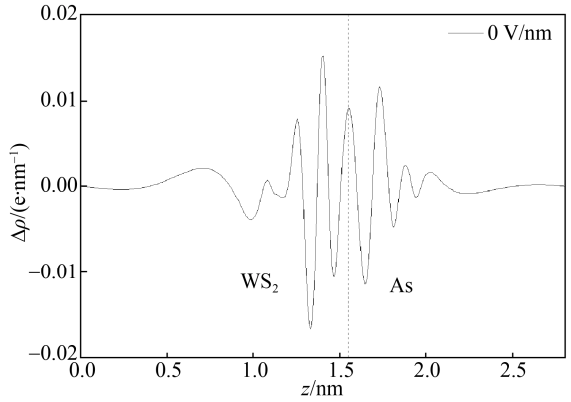
其中：$\rho_S(x,y,z)$、$\rho_{WS_2}(x,y,z)$和$\rho_{As}(x,y,z)$分别表示砷烯/WS_2异质结、砷烯和单层 WS_2在(*x*,*y*,*z*)点的电荷密度。由图 8a 可以看出，没有外加电场时，砷烯层的电子减少，WS_2层的电子增加，砷烯和单层 WS_2通过微弱的 van der Waals 作用形成异质结后电子由砷烯转移到了 WS_2，而空穴则由 WS_2转移到了砷烯。电荷在砷烯/WS_2异质结的界面进行了重新分布，电荷的重新分布导致界面附近电子–空穴对的产生。为了研究外电场对电荷转移的影响，图 8b 和图 8c 分别为在负外电场和正外电场作用下沿 *z* 方向的电荷差分密度。对异质结施加负的外电场时，电子由 WS_2转移到了砷烯，而空穴则由砷烯转移到了 WS_2。与负的外电场相反，正的外电场驱使电子由砷烯转移到了 WS_2，而空穴则由 WS_2转移到了砷烯。电荷转移的数量与外加电场的方向无关，只与外加电场的大小有关，且随着外加电场的增大而逐渐增加。在外电场作用下，砷烯和单层 WS_2之间更多的电荷转移意味着两者的相互作用进一步加强，并进一步引起异质结中砷烯和单层 WS_2各自的导带底和价带顶的移动，最终导致带隙宽度和能带排列的改变。

2.4　应变对砷烯/WS_2异质结电子结构的影响

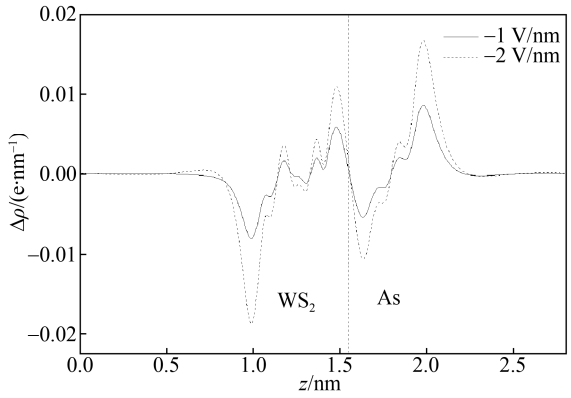
施加了垂直于砷烯/WS_2异质结平面的应变。通过改变异质结中砷烯和 WS_2的层间距，实现了施加应变的目的，层间距变小时应变为负对应压缩应变，层间距变大时应变为正对应拉伸应变。应变(*ε*)可用公式(3)表示:

$$\varepsilon=(d-d_0)/d_0 \tag{3}$$

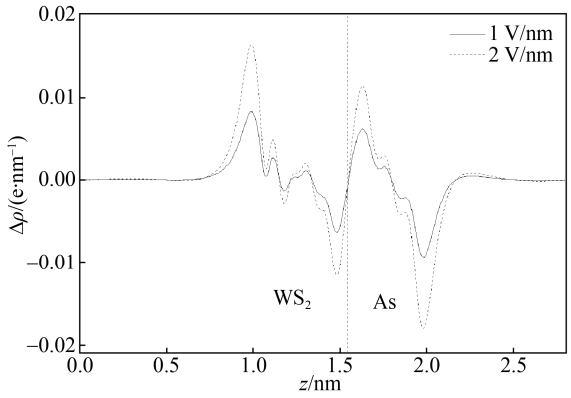
其中：*d* 和 d_0 分别是施加应变和未施加应变时异质结的层间距。图 9a 是带隙宽度随应变的变化关系。由图 9a 可以看出，对异质结施加垂直方向的压缩应变时，带隙宽度单调减小，最终在应变为–33%时带



(a) Without the external electric field



(b) Negative external electric field



(c) Positive negative external electric field

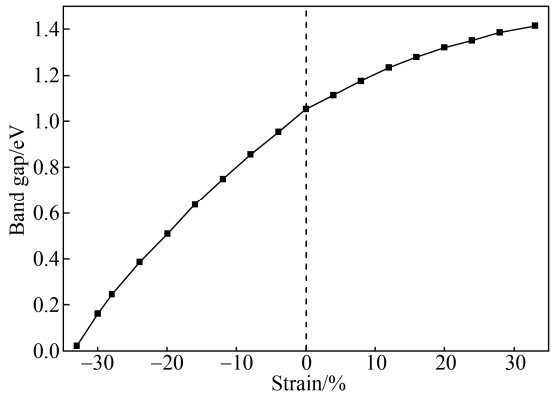
Black vertical dashed line denotes the boundary between arsenene layer and WS_2 layer.

图 8 平面平均差分电荷密度

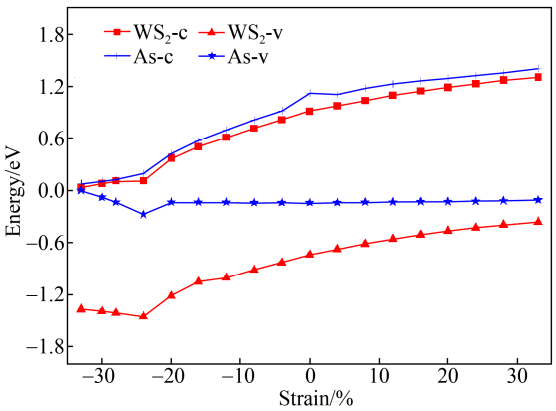
Fig. 8 Plane-averaged differential charge density

隙宽度变为 0。Bader 电荷分析表明，对异质结施加 0%、–10%、–20%和–30%的应变时，由砷烯转移到 WS_2 的电荷数分别为 0.048 0、0.097 0、0.160 6 和 0.296 2 e，转移的电荷越多形成的内建电场越大，从而导致异质结的带隙宽度越小。对异质结施加垂直方向的拉伸应变时，带隙宽度缓慢增加，这是由于层间距变大时层间相互作用变弱，由砷烯转移到 WS_2 的电荷数变少，Budd 电荷分析的结果也证明了这一点。对异质结施加 0%、10%、20%和 30%的应变时，由砷烯转移到 WS_2 的电荷数分别为 0.048、0.031、0.024 和 0.015 e，转移的电荷越少意味着异质结中砷烯和 WS_2 的波函数重叠越少，导致能带变窄，带隙变宽。

图 9b 是砷烯/WS_2 异质结的导带底和价带顶随应变的变化关系。从图 9b 可以看出，对异质结不施加应变时，砷烯/WS_2 异质结为第 II 类能带排列。对异质结施加压缩应变时，WS_2 的导带底和价带顶以及砷烯的导带底快速下降，而砷烯的价带顶缓慢上升。对异质结施加拉伸应变时，WS_2 的导带底和价带顶以及砷烯的导带底快速上升，而砷烯的价带顶几乎不变。不管施加压缩应变还是拉伸应变，砷烯的导带底和价带顶都高于 WS_2 的导带底和价带顶，



(a) Band gap



(b) Conduction band minimum and valence band maximum

WS_2-c, As-c and WS_2-v, As-v are the conduction band minimum and valence band maximum of WS_2 and arsenene in the arsenene/WS_2 heterostructure, respectively.

图 9 砷烯/WS_2 异质结的带隙宽度以及导带底和价带顶随应变的变化关系

Fig. 9 Evolution of the band gap and the conduction band minimum and valence band maximum of the arsenene/WS_2 heterostructure with the strain

异质结的导带底和价带顶分别为 WS_2 和砷烯的贡献，即施加垂直方向的应变时砷烯/WS_2 异质结的能带排列类型保持不变，始终为第Ⅱ类能带排列。

传统的 PBE 方法低估了带隙，但由于杂化泛函(HSE)巨大的计算成本，本工作研究的所有体系依然使用了 PBE 方法，所强调的目标不是确定精确的带隙以及异质结能带排列类型转变时所对应的精确电场和应变值，而是为了揭示外电场和应变对异质结电子结构的调控机理。PBE 方法可以正确预测带隙和异质结能带排列的变化趋势。

3　结论

采用基于密度泛函理论的第一性原理计算系统研究了电场和应变对砷烯/WS_2 异质结电子结构的影响。计算结果表明最稳定的构型是顶部构型，形成能为负值意味着顶部构型从能量角度来看是稳定的。砷烯/WS_2 异质结为间接带隙半导体，其能带排列为第Ⅱ类。外电场能够有效调控异质结的带隙宽度，带隙宽度对正负外电场的响应是不同的，其原因在于异质结中存在内建电场。更重要的是外电场能够有效调控异质结的能带排列类型，使异质结在第Ⅰ类和第Ⅱ类能带排列之间转换。计算结果还表明，应变可以调控异质结的带隙宽度，但不能调控异质结的能带排列类型。

参考文献:

[1] GEIM A K, NOVOSELOV K S. The rise of graphene[J]. Nat Mater, 2007, 6: 183–191.

[2] SCHWIERZ F. Graphene transistors[J]. Nat Nanotechnol, 2010, 5: 487–496.

[3] RADISAVLJEVIC B, RADENOVIC A, BRIVIO J, et al. Single-layer MoS_2 transistors[J]. Nat Nanotechnol, 2011, 6: 147–150.

[4] YIN Z, LI H, JIANG L, et al. Single-layer MoS_2 phototransistors[J]. ACS Nano, 2012, 6: 74–80.

[5] LI L, YU Y, Ye G J, et al. Black phosphorus field-effect transistors[J]. Nat Nanotechnol, 2014, 9: 372–377.

[6] GONG C, ZHANG H, WANG W, et al. Band alignment of two-dimensional transition metal dichalcogenides: Application in tunnel field effect transistors[J]. Appl Phys Lett, 2013, 103: 053513.

[7] ROY T, TOSUN M, KANG J S, et al. Field-effect transistors built from all two dimensional material components[J]. ACS Nano, 2014, 8: 6259–6264.

[8] KOPPENS F H L, MUELLER T, AVOURIS P, et al. Photodetectors based on graphene, other two-dimensional materials and hybrid systems[J]. Nature Nanotech, 2014, 9: 780–793.

[9] HU P, WEN Z, WANG L, et al. Synthesis of few-layer GaSe nanosheets for high performance photodetectors[J]. ACS Nano, 2012, 6: 5988–5994.

[10] ZHU Z, GUAN J, TOMANEK D. Strain-induced metal-semiconductor transition in monolayers and bilayers of gray arsenic: A computational study[J]. Phys Rev B, 2015, 91: 161404.

[11] LI W, WANG T X, DAI X Q, et al. Tuning the Schottky barrier in the arsenene/graphene van der Waals heterostructures by electric field[J]. Physica E, 2017, 88: 6–10.

[12] ZHANG S, YAN Z, LI Y, et al. Atomically thin arsenene and antimonene: Semimetal semiconductor and indirect direct band-gap transitions[J]. Angew Chem, 2015, 127: 3155−3158.

[13] ZHANG S, XIE M, LI F, et al. Semiconducting group 15 monolayers: A broad range of band gaps and high carrier mobilities[J]. Angew Chem, 2016, 55: 1666−1669.

[14] KECIK D, DURGUN E, CIRACI S. Optical properties of single-layer and bilayer arsenene phases[J]. Phys Rev B, 2016, 94: 205410.

[15] WANG Y, DING Y. Unexpected buckled structures and tunable electronic properties in arsenic nanosheets: Insights from first-principles calculations[J]. J Phys Condens Matter, 2015, 27: 225304.

[16] ZHANG Z Y, CAO H N, ZHANG Y H, et al. Orientation and strain modulated electronic structures in puckered arsenene nanoribbons[J]. AIP Adv, 2015, 5: 067117.

[17] TANG W, SUN M, REN Q, et al. Halogenated arsenenes as Dirac materials[J]. Appl Surf Sci, 2016, 376: 286–289.

[18] ZHANG Q, SCHWINGENSCHLÖGL U. Emergence of Dirac and quantum spin hall states in fluorinated monolayer As and AsSb[J]. Phys Rev B, 2016, 93: 045312.

[19] WANG C, XIA Q, NIE Y, et al. Strain engineering band gap, effective mass and anisotropic Dirac-like cone in monolayer ar-senene[J]. AIP Adv, 2016, 6: 035204.

[20] XU C, ZHU M, ZHENG H, et al. Stability, electronic structure and magnetic properties of vacancy and nonmetallic atom-doped buckled arsenene: First-principles study[J]. RSC Adv, 2016, 6: 43794–43801.

[21] LI Z, XU W, YU Y, et al. Monolayer hexagonal arsenene with tunable electronic structures and magnetic properties *via* impurity doping[J]. J Mater Chem C, 2016, 4: 362–370.

[22] PAN D, WANG L, LI Z, et al. Synthesis of graphene quantum dot/metal–organic framework nanocomposites as yellow phosphors for white light-emitting diodes[J]. New J Chem, 2018, 42: 5083–5089.

[23] JIA S, SUN H D, DU J H, et al. Graphene oxide/graphene vertical heterostructure electrodes for highly efficient and flexible organic light emitting diodes[J]. Nanoscale, 2016, 8: 10714–10723.

[24] MOURI S, MIYAUCHI Y, MATSUDA K. Tunable photoluminescence of monolayer MoS_2 *via* chemical doping[J]. Nano Lett, 2013, 13: 5944–5948.

[25] CHENG Y C, GUO Z B, MI W B, et al. Prediction of two-dimensional diluted magnetic semiconductors: Doped monolayer MoS_2 systems[J]. Phys Rev B, 2013, 87: 100401.

[26] LEE J, HUANG J, SUMPTER B G, et al. Strain-engineered optoelectronic properties of 2D transition metal dichalcogenide lateral heterostructures[J]. 2D Mater, 2017, 4: 021016.

[27] LU N, GUO H, LI L, et al. MoS_2/MX_2 heterobilayers: Bandgap engineering *via* tensile strain or external electrical field[J]. Nanoscale, 2014, 6: 2879–2886.

[28] LIU Q, LI L, LI Y, et al. Tuning electronic structure of bilayer MoS_2 by vertical electric field: A first-principles investigation[J]. J Phys Chem C, 2012, 116: 21556–21562.

[29] PONYES R B, MIWA R H, DA SILVA A J R, et al. Layer-dependent band alignment of few layers of blue phosphorus and their van der Waals heterostructures with graphene[J]. Phys Rev B, 2018, 97: 235419.

[30] SHU H, TONG Y, GUO J. Novel electronic and optical properties of ultrathin silicene/arsenene heterostructures and electric field effects[J]. Phys Chem Chem Phys, 2017, 19: 10644–10650.

[31] BLÖCHL P E, Projector augmented-wave method[J]. Phys Rev B, 1994, 50: 17953–17979.

[32] KRESSE G, FURTHMÜLLER J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set[J]. Phys Rev B, 1996, 54: 11169–11186.

[33] GRIMME S, Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction[J]. J Comput Chem, 2006, 27: 1787–1799.

[34] KERBER T, SIERKA M, SAUER J. Application of semiempirical long-range dispersion corrections to periodic systems in density functional theory[J]. J Comput Chem, 2008, 29: 2088–2097.

[35] ZHANG S, HU Y, HU Z, et al. Hydrogenated arsenenes as planar magnet and Dirac material[J]. Appl Phys Lett, 2015, 107: 022102.

[36] YUN W S, HAN S W, HONG S C, et al. Thickness and strain effects on electronic structures of transition metal dichalcogenides: 2H-MX_2 semiconductors (M=Mo, W; X=S, Se, Te)[J]. Phys Rev B, 2012, 85: 033305.

[37] RAMASUBRAMANIAM A, NAVEH D, TOWE E. Tunable band gaps in bilayer transition metal dichalcogenides[J]. Phys Rev B, 2011, 84: 205325.