第 48 卷第 4 期　　硅　酸　盐　学　报　　Vol. 48，No. 4
2020 年 4 月　　JOURNAL OF THE CHINESE CERAMIC SOCIETY　　April，2020
http://www.gxyb.cbpt.cnki.net　　**DOI**：10.14062/j.issn.0454-5648.20190552

单层 Janus 材料 $GaInSe_2$ 的电子结构第一原理计算

徐贤达，孙伟峰

(哈尔滨理工大学电气与电子工程学院，工程电介质及其应用教育部重点实验室，
黑龙江省电介质工程重点实验室，哈尔滨 150080)

摘　要：按照第一原理赝势平面波方法研究具有稳定间接带隙的单层 Janus 二维半导体 $GaInSe_2$ 的电子结构，探讨构建 Janus 结构的单层 GaSe 和 InSe 与 $GaInSe_2$ 的结构和电子性质之间的内禀关系。原子结构和声子色散谱的计算结果证明单层 $GaInSe_2$ 与 GaSe 和 InSe 有着相似的六边形几何构型，具有动态稳定的 Janus 结构。电子能带结构表明 $GaInSe_2$ 与其二元类似物 GaSe 和 InSe 都是间接带隙半导体，GaSe 和 InSe 之间的应变和功函数决定了单层 $GaInSe_2$ 电子结构的基本特征。当原子层平面方向上的应变小于临界值时，单层 $GaInSe_2$ 可转化为直接带隙半导体。因此，在应变小于临界应变的力学条件下，单层 $GaInSe_2$ 可用作二维或表面光电材料。此外，通过调节层平面方向上的应变，可以有效地控制 $GaInSe_2$ 能带的带边特性和带隙宽度，这对于场效应晶体管的潜在应用具有重要意义。

关键词：Janus 二维结构；电子结构；第一原理计算；光电子材料
中图分类号：TM911　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2020)04–0507–07
网络出版时间：2019–12–26



First-Principles Investigation of $GaInSe_2$ Monolayer as a Janus Material

XU Xianda, *SUN Weifeng*

(Key Laboratory of Engineering Dielectrics and Its Application, Ministry of Education, Heilongjiang Provincial Key Laboratory of Dielectric Engineering, School of Electrical and Electronic Engineering, Harbin University of Science and Technology, Harbin 150080, China)

Abstract: The stable $GaInSe_2$ monolayer as a Janus structure with an indirect band-gap was investigated *via* first-principles electronic structure calculations. The intrinsic correlation between $GaInSe_2$ monolayer and its binary analogues (GaSe and InSe monolayers) was investigated in terms of atomic structure and electronic property. The calculation results of atomic structure and phonon frequency dispersion indicate that $GaInSe_2$ monolayer has a dynamically stable Janus structure with the similar hexagonal geometry as GaSe and InSe monolayers. The electronic band structures show that $GaInSe_2$ monolayer and its binary analogues are all indirect band-gap semiconductors. It is noted from the strained Janus model that work functions and coherent strains of GaSe and InSe constituents essentially determine the electronic structure of $GaInSe_2$ monolayer. $GaInSe_2$ monolayer can be converted into direct band-gap semiconductor when the strain in atomic plane is decreased less than a critical value. Therefore, $GaInSe_2$ monolayer can be applied to 2-dimensional or surface photoelectric materials under the mechanical conditions below the critical strain. Further, the band-edge character and band-gap width can be effectively controlled by modifying the strains in atomic plane of $GaInSe_2$ monolayer, which is of great significance for the potential application in field effect nanotransistors.

Keywords: two-dimensional Janus structure; electronic structure; first-principles calculation; optoelectronic material

自从具有高导电性和稳定超薄结构的石墨烯被发现以来，具有特殊电学性质的二维材料成为科学与技术应用研究的前沿领域[1–2]。继石墨烯之后，过渡金属二卤化物因其具有独特的电子和器件性能而

收稿日期：2019–08–06。　修订日期：2019–09–16。
基金项目：中国博士后科学基金面上资助二等资助(2013M531058)；国家自然科学基金(51607048)。
第一作者：徐贤达(1994—)，男，硕士。
通信作者：孙伟峰(1977—)，男，博士，副教授。

Received date: 2019–08–06.　**Revised date:** 2019–09–16.
First author: XU Xianda (1994–), male, Master candidate.
E-mail: xuxianda1994@126.com
Correspondent author: SUN Weifeng (1977–), male, Ph.D., Associate Professor.
E-mail: sunweifeng@hrbust.edu.cn

受到重点关注[3–9]。随着新型二维材料的快速发展，二维 III–VI 族材料和过渡金属二卤化物成为了最新的研究热点[10–18]。InSe 是一种层状结构材料，具有较强的层内键合以及较弱的 Van der Waals 层间键合，每个分子层由 4 个六角形原子面构成，原子面的排列顺序为 Se−In−In−Se，而 GaSe 具有与 InSe 相同的二维平面六角形单层结构[19]。在惰性气体中，被六方氮化硼包围的多层 InSe 的电子迁移率在室温和液氮温度下分别超过 10^3 和 10^4 $cm^2·V^{-1}·S^{-1}$[20]。在 Al_2O_3 涂有聚甲基丙烯酸甲酯作为介电层的 InSe 场效应晶体管能够使室温场效应电子迁移率达到 1 000 $cm^2·V^{-1}·S^{-1}$，与应变硅薄膜的电子迁移率相当[21]。

Gennes 在 1991 年诺贝尔颁奖大会上首次用 Janus 来描述一类由两半球面组成且具有 2 种不相同的化学性质的粒子。Cheng 和 Yao 对单层 MoSSe Janus 结构进行了理论计算研究[22–23]；Lu 等[24]的实验研究成功的将 MoS_2 结构改性为 S−Mo−Se 夹层；Zhang 等[25]通过实验证明用 S 原子交换 $MoSe_2$ 的 Se 原子层能够制成具有 Janus 结构单层 MoSSe，发现 Janus 结构的动力学和电子性质出现了一种关键转变。以上实验证明制备单层 MoSSe Janus 结构可以采用对其他二维硫族化合物或后二维材料的共价键合层层内裁割的方法[24–25]。然而在这些报道中没有系统的研究单层 Janus 结构的电子能带结构中带隙大小和类型形成的原因，并且由于单层 GaSe 和 InSe 具有独特的电子性质和光学性能，因此需要对单层 InSe 和 GaSe 组成的 $GaInSe_2$ Janus 结构进行深入的理论研究[26]。本工作通过第一原理能量和电子结构计算对单层 $GaInSe_2$ 的 Janus 结构和电子性质进行了理论研究。

1 理论计算方法

第一原理电子结构计算采用自旋极化赝势平面波方法，使用 Materials Studio 8.0 软件的 CASTEP 程序。采用广义梯度近似(GGA)的 PBEsol 的交换相关泛函形式，采用超软赝势(ultrasoft pseudopotential)描述原子实与电子的相互作用[27]。Khon-Sham 电子本征态波函数由平面波基组展开，平面波基组的截止能量(cutoff energy)设为 500 eV，并使用有限基组校正(finite basis-set correction)。Brillouin 区上的 k 点取样在 Monkhorst-Pack 3×3×1 格点上进行。计算电子密度的 FFT 格子设为 24×24×108，增强电荷密度的比例因数设为 4.0。自洽场(SCF)迭代计算的收敛容忍度设为 10^{-6} eV/atom，使用 Pulay 密度混合方案，电荷混合幅度为 0.2，混合截止为 1.5/Å[28]。晶体结构和原子排列由能量泛函最小化的几何优化计算获得，几何优化前的初始结构根据文献报道的实验测试结构进行建模[29]。采用 BFGS 算法对初始建模的原子结构进行几何优化，优化的能量收敛度设为 $5×10^{-6}$ eV/atom，使各原子之间作用力和内应力分别小于 0. 1 eV/nm 和 0.02 Pa。

2 结果与讨论

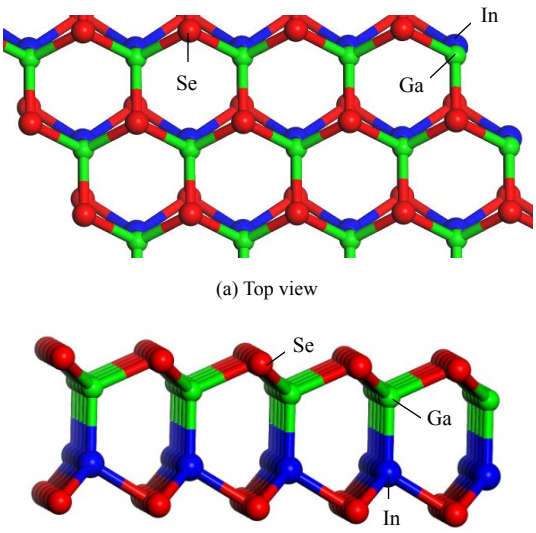
2.1 单层 $GaInSe_2$ 的 Janus 结构

先对二元类似物(GaSe 和 InSe)的结构和电子性质进行计算和分析。单层 GaSe 和 InSe 由共价键合表面的硫族化合物和结构外壳中的 2 层离子组成。单层 GaSe 和 InSe 的晶体结构为六角形晶格，计算得到的晶格常数 $a=b$ 分别为 0.381 和 0.409 nm，上下 2 个 Se 单原子层之间的距离(即单层 GaSe 和 InSe 的厚度)分别是 0.488 和 0.549 nm。Ga−Se 和 In−Se 的距离分别是 0.251 和 0.271 nm。单层 GaSe 和 InSe 的内壳层 Ga−Ga 和 In−In 距离分别为 0.249 和 0.288 nm，由总能量的结果可知这 2 种单层结构都是基态无磁性。由 Mulliken 电荷布局分析可知，Se 原子从 Ga 原子处获得 0.25e 电子电荷，从 In 原子处获得 0.34e 电子电荷。单层 GaSe 和 InSe 的内聚能分别是 3.52 和 3.27 eV/atom，因此 InSe 比 GaSe 更容易形成具有 Janus 结构的单层 $GaInSe_2$。

单层 $GaInSe_2$ 是典型的 Janus 二维结构，并保持了二元单层 GaSe 和 InSe 平面结构的对称性，如图 1 所示。$GaInSe_2$ 是由共价键构成的翘曲单层 Janus 二维材料：外层 2 层离子是 Se，壳层内的 2 层离子是 Ga 和 Se 离子。单层 $GaInSe_2$ 由六角形原胞组成，几何优化后的晶格参数为 $a=b$=0.394 nm，其中 Ga−In、Ga−Se 和 In−Se 的键长分别是 0.269，0.256 和 0.267 nm。显然 Janus 结构中 Ga 和 In 原子之间的相互作用对结构的影响最大，其中稼原子平面受拉应变，而铟原子平面受压应变。单层 $GaInSe_2$ 的厚度为 0.521 nm，略高于其单层二元类似物厚度的平均值。$GaInSe_2$ 结构还表现出和 GaSe 以及 InSe 相似的强离子性。

通过第一原理总能量计算得到单层 $GaInSe_2$ 的内聚能为 3.39 eV/atom，介于 2 种二元类似物之间。这种高内聚能意味着单层 $GaInSe_2$ 的化学键具有较强的键能。为了验证 $GaInSe_2$ 的结构稳定性，分别对 GaSe 和 InSe 进行对 Ga 和 In 的替换，结果表明，InSe 更容易向 $GaInSe_2$ 转变，并释放能量；而 GaSe

不容易向 $GaInSe_2$ 转变，需要吸收能量才能形成 $GaInSe_2$ 的 Janus 结构。



Red, green and blue balls represent Se, Ga and In atoms respectively.

图 1　单层 $GaInSe_2$ 几何优化结构

Fig. 1　Geometrically optimized structure of $GaInSe_2$ monolayer

2.2　声子特性

单层 $GaInSe_2$ 的原始单胞有 2 个铟原子、1 个硫原子和 1 个硒原子，因此它的声子谱中有 12 个声子分支，其中 3 个是声学支，9 个是光学支，图 2 为 Janus $GaInSe_2$ 声子结构频率色散曲线。9 个光学支包括 4 个非简并(3.52，5.89，6.51 和 6.82 THz)和 2 个双简并(1.39 和 5.73 THz)的振动模式。由二维材料的对称性可知该材料存在 TO−LO 分裂，即存在横光学波与纵光学波频率不简并，否则该材料结构应该是 3 个非简并和 3 个双简并光学波的振动模式，即单层 $GaInSe_2$ 为极性材料。单层 $GaInSe_2$ 在 Brillouin 区中所有声子模态的本征频率都为正值，表明单层 $GaInSe_2$ 是动态稳定的，从原子振动的形式来看，可以构建独立的单层 $GaInSe_2$ 二维 Janus 结构。

2.3　电子结构

单层 GaSe、InSe 和 $GaInSe_2$ 的电子能带结构计算结果如所示。由图 3a~图 3c 可见，这些单层结构都是类似的间接带隙半导体，价带顶(VBM)和导带底(CBM)分别位于 Brillouin 区 *K*~*G* 之间和 *G* 点，带隙宽度分别为 1.81、1.42 和 1.36 eV。GaSe，InSe 和 $GaInSe_2$ 的功函数分别为 5.75、5.89 和 5.87 eV，因此在 $GaInSe_2$ 的功函数在 Ga 一侧较大，而在 In 一侧较小。所有的单层 GaSe 和 InSe 的结构和电子特性总结在表 1 中，便于与 $GaInSe_2$ 进行比较。单层 $GaInSe_2$ 的带隙宽度小于其 GaSe 和 InSe，这是由于 Janus 结构中二元类似物的拉伸和应变。以单层 $GaInSe_2$ 的 Janus 结构晶格常数作为参考，根据单层 GaSe 和 InSe 的晶格常数计算应变值的百分比：在单层 $GaInSe_2$ 形成时，Ga 受到了 3.27%的拉应变，In 受到了 3.02%的压应变。

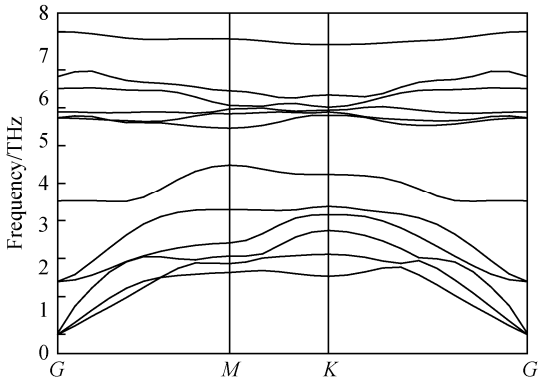
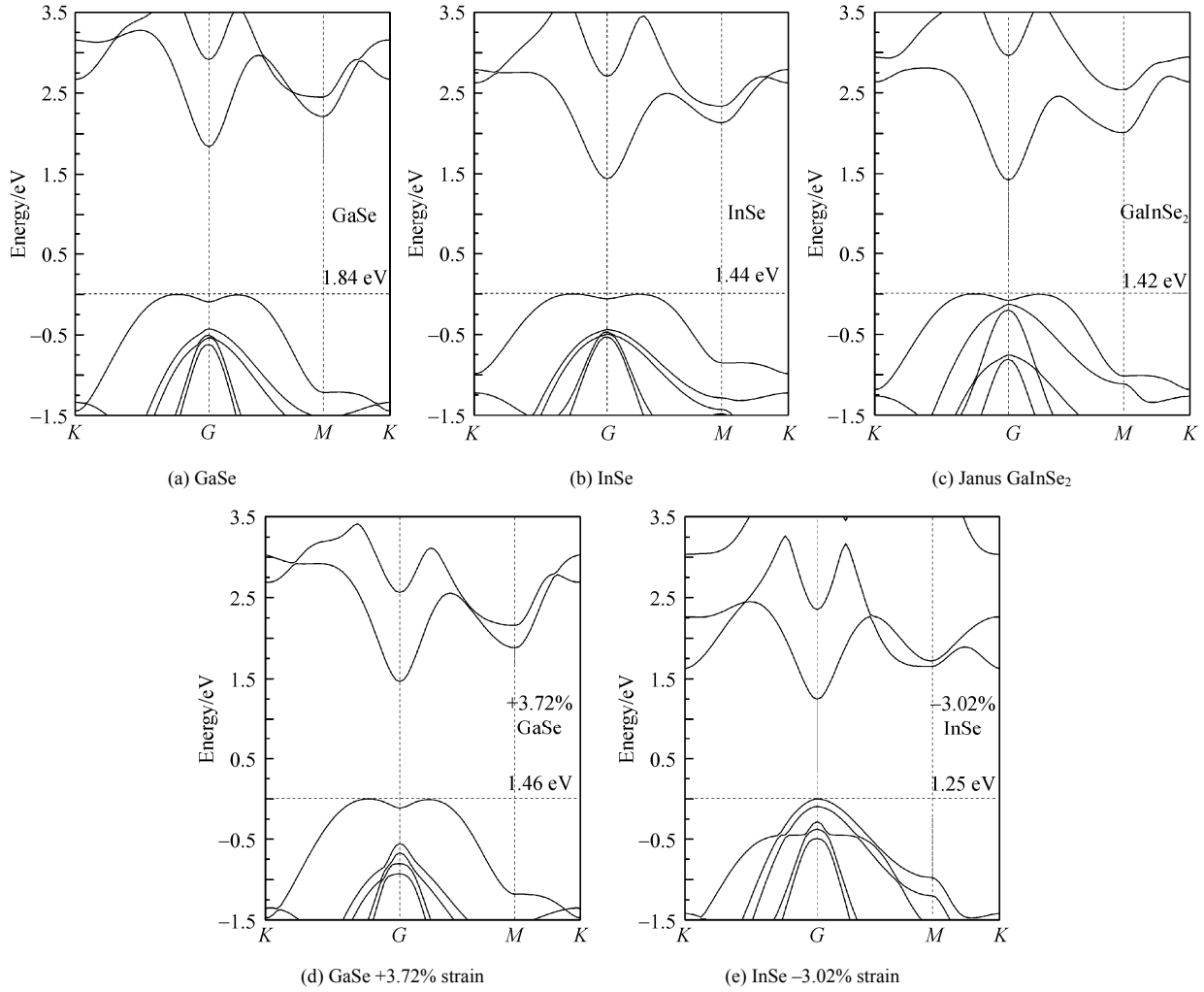


图 2　单层 $GaInSe_2$ 的声子色散曲线

Fig. 2　Phonon structure (dispersion curves) of $GaInSe_2$ monolayer

对于 2 种材料的异质结构，特别是半导体，异质结处的电子能带的构建是通过电子亲和规则完成的，也称为 Anderson 规则，它表示材料的真空能级相同[30]。因此由于平衡条件的存在，材料的能带排列是随着连接处 Fermi 能级的融合而形成的。Janus 材料的二元类似物通过应变调整电子能带的 Fermi 能级，从而形成 Janus 结构的电子能带，并且根据 Anderson 法则要求每个 Janus 半体必须具有相同的真空能级。为了研究 $GaInSe_2$ 的带隙随力学状态的变化，计算应变条件下单层 GaSe 和 InSe 的电子结构。应变以后的 InSe 能带由间接带隙转变为直接带隙，带隙宽度减小为 1.25 eV；而应变 GaSe 仍然为间接带隙半导体，带隙宽度减小至 1.46 eV。应变 GaSe 和 InSe 的 VBM 能级分别是−3.44 和−4.53 eV(以真空自由电子能级为参考能量零点)，由此可计算出应变单层 GaSe 和 InSe 的 G 点 CBM 能级分别是−1.98 和−3.28 eV，而单层 $GaInSe_2$ 的 VBM 能级为−4.25 eV。应变 GaSe 和 InSe 被 In 和 Ga 原子替换后分别导致 VBM 能量下降和升高，所以二者构建的复合结构 $GaInSe_2$ 的 CBM 介于−1.98 和−3.28 eV 之间；应变 GaSe 的功函数比 InSe 的功函数更小，Fermi 能级的电子更容易转移到固体表面，所以单层 $GaInSe_2$ 中 GaSe 侧的 VBM 点要略高

于 InSe 侧的 VBM 点，$GaInSe_2$ 的带隙宽度介于二者之间为 1.42 eV，且为间接带隙。由 Helmholtz 方程可知功函数正比于电偶极矩[31]，因此根据 GaSe 和 InSe 的功函数变化推断拉伸应变能够降低电偶极矩，而压缩应变可以增大电偶极矩。因此 Janus 二维材料的能带结构决定于其二元类似物在构建稳定弛豫结构以后的组成材料(GaSe 和 InSe)拉伸和压缩应变所引起的电偶极矩变化。



(a) GaSe (b) InSe (c) Janus $GaInSe_2$

(d) GaSe +3.72% strain (e) InSe –3.02% strain

图 3 单层 GaSe，InSe，Janus $GaInSe_2$ 和应变单层 GaSe 和 InSe 的能带结构，价带顶为能量参考点

Fig. 3 Electronic band structures of GaSe, InSe, Janus $GaInSe_2$ monolayers and strained GaSe and InSe monolayers with the valence band maximum as energy reference

表 1 单层 GaSe、InSe 和 $GaInSe_2$ 的原子结构、能带带隙和功函数、以及 Ga 和 In 原子上的电荷转移

Table 1 Atomic structure, band-gap and work function of GaSe, InSe and $GaInSe_2$ monolayers, and charge transfer on Ga and In atoms

Material	a/nm	b/nm	d_{M-M}/nm	d_{Ga-Se}/nm	d_{In-Se}/ nm	l/nm	$\Delta\rho_{Ga}$/e	$\Delta\rho_{In}$/e	E_{coh}/(eV·atom^{-1})	E_g/eV	Φ/eV
GaSe	0.381	0.381	0.249	0.251		0.488	0.25		3.52	1.84	5.75
InSe	0.409	0.409	0.288		0.271	0.549		0.34	3.27	1.44	5.89
$GaInSe_2$	0.394	0.394	0.269	0.256	0.267	0.521	0.34	0.28	3.39	1.42	5.87

a and b is lattice constants; d_{M-M} (M=Ga, In) is an atomic distance; d_{Ga-Se} and d_{In-Se} are bond lengths; l is the distance between Se atoms in two individual layers; $\Delta\rho_{Ga}$ and $\Delta\rho_{In}$ are the total charge transfer quantities on the Ga side and In side respectively; E_{coh} is the cohesion energy; E_g is the band-gap; Φ is the work function.

2.4 应变对单层 $GaInSe_2$ 电子结构的作用

材料的电子结构不仅决定了原子的配位，还决定了原子振动和电子特性。因此应变效应很大程度上决定了材料的电子特性。除此之外，由于应变对

于超薄材料有很大的影响，所以必须考虑应变对超薄材料的电子性能的影响。为了研究应变对单层 Janus $GaInSe_2$ 电子结构的作用，考察了 3 种应变机制对二维材料能带结构的影响。通过对 Janus 结构进行双轴和平面单轴应变，研究其带隙特性的变化。

图 4 是单层 $GaInSe_2$ 的电子结构随其应变率变化：带隙宽度在 1.11~1.34 eV 之间，表现出具有鲁棒性的间接带隙能带结构；特别锯齿和扶手椅方向上的单轴应变超过 1.5%压应变时才转变为直接带隙，临界带隙宽度都是 1.51 eV。

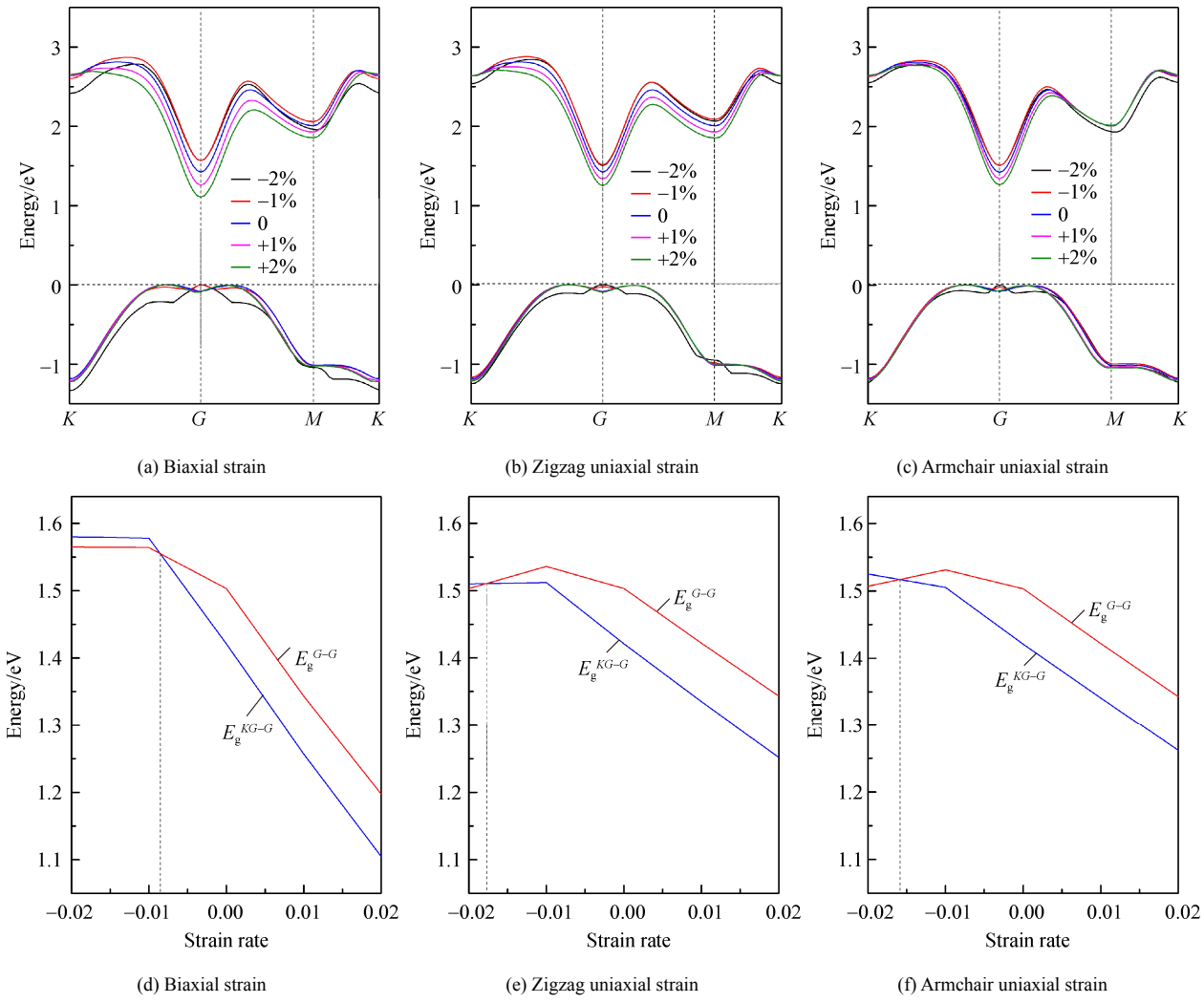


图 4　单层 $GaInSe_2$ 电子能带带边以及带隙随应变的变化

Fig. 4　Electronic band edge and band gap of $GaInSe_2$ varying with strain

在 3 种应变条件下，单层 $GaInSe_2$ 的电子能带都会转变为直接带隙，VBM 和 CBM 同时位于 G 点，而未发生转变的间接带隙的 VBM 和 CBM 仍分别位于 K~G 点中间和 G 点，如图 4a~图 4c 所示。为了能够深入研究带隙类型和带隙大小随应变的关系，分别计算双轴应变和 2 种方向(锯齿和扶手椅晶向)单轴应变条件下单层 $GaInSe_2$ 的间接带隙(K~G 处价带顶到 G 点导带底，E_g^{KG-G})和 G 点直接带隙(E_g^{G-G})随应变率的变化，结果如图 4d~图 4e 所示。单层 $GaInSe_2$ 在 3 种应变下的应变率在小于临界值时呈现直接带隙的半导体能带结构，而在大于临界值时则转变为间接带隙半导体。双轴应变和 2 个方向单轴应变的 $GaInSe_2$ 应变临界值分别为−0.9%、−1.8%和−1.6%。

图 5 为双轴应变(−2%~+2%)单层 $GaInSe_2$ 的各元素原子轨道投影态密度，呈现 $GaInSe_2$ 的单层 Janus 结构在应变条件下 VBM 和 CBM 的各元素原子轨道组成。单层 $GaInSe_2$ 及其双轴应变之后的 VBM 和 CBM 的原子轨道组成部分相同，VBM 主要由 Se 原子的 p 轨道组成，CBM 主要由 Se 原子

的 p 轨道、Ga 原子的 s 轨道和 In 原子的 p 轨道组成。由此可见，Se 原子的 p 轨道的电子密度主要影响了 $GaInSe_2$ 的电子能带带边的色散曲线及带隙宽度。

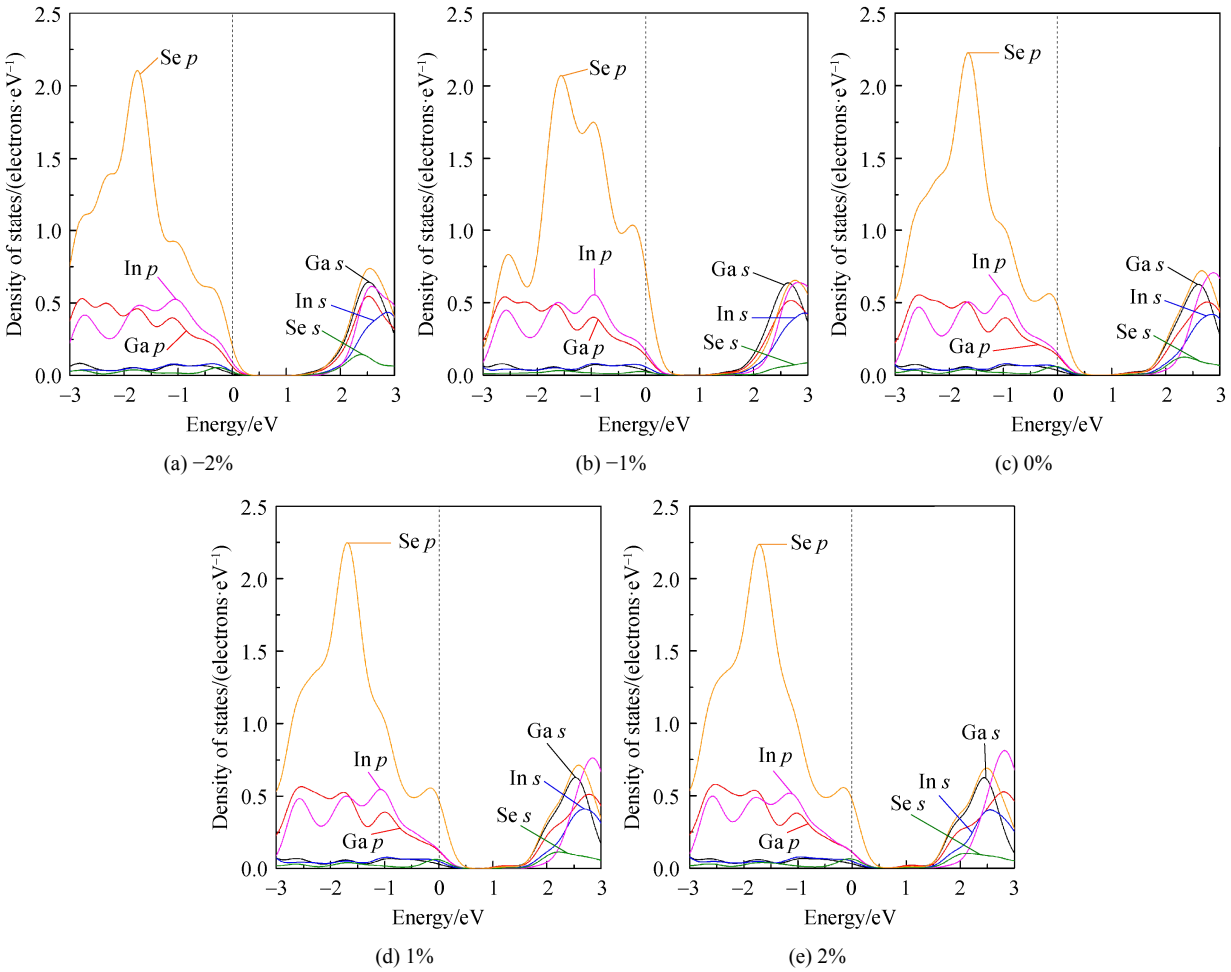


图 5 双轴应变下单层 $GaInSe_2$ 的电子能态密度

Fig. 5 Density of states from $GaInSe_2$ monolayer under biaxial strains

3 结论

三元单层 $GaInSe_2$ 的 Janus 结构和电子性质与其二元类似物 GaSe 和 InSe 之间存在着很强的关系。由于 $GaInSe_2$ 比 InSe 有着更高的内聚能，所以通过将 In 原子替换成 Ga 原子能得到稳定的 $GaInSe_2$。声子谱表明 $GaInSe_2$ 是动态稳定的极性材料，而电子能带结构由构建 $GaInSe_2$ 的应变二元类似物的电子能带结构叠加而成，形成的电子带隙主要源自于应变 GaSe。$GaInSe_2$ 的电子特性会因层平面应变而发生质的改变，在小于其应变率临界时能够转化为直接带隙半导体，因此在应变率临界值以下能够应用于光电材料。

参考文献:

[1] TENG C, XIE D, WANG J, et al. Ultrahigh conductive graphene paper based on ball-milling exfoliated graphene[J]. Adv Funct Mater, 2017, 27(20): 1700240.

[2] CHEN K, XUE D, KOMARNENI S. Nanoclay assisted electrochemical exfoliation of pencil core to high conductive graphene thin-film electrode[J]. J Colloid Interf Sci, 2017, 487: 156–161.

[3] BARHOUMI M, LAZAAR K, SAID M. Electronic and vibrational properties of TMDs heterogeneous bilayers, nontwisted bilayers silicene/TMDs heterostructures and photovoltaic heterojunctions of fullerenes with TMDs monolayers[J]. Physica E, 2018, 104: 155–164.

[4] PALUMMO M, BERNARDI M, GROSSMAN J C. Exciton radiative life times in two-dimensional transition metal dichalcogenides[J]. Nano Lett, 2015, 15(5): 2794–2800.

[5] NIE Y, HONG S, WALLACE R M, et al. Theoretical demonstration of the ionic barristor[J]. Nano Lett, 2016, 16(3): 2090–2095.

[6] YANG B, MOLINA E, KIM J, et al. Effect of distance on photoluminescence quenching and proximity-induced spin–orbit coupling in graphene/WSe_2 heterostructures[J]. Nano Lett, 2018,18(6): 3580–3585.

[7] ROSS J S, KLEMENT P, JONES A M, et al. Electrically tunable excitonic light-emitting diodes based on monolayer WSe_2 p–n

junctions[J]. Nat Nanotechnol, 2014, 9(4): 268–272.

[8] CHUANG H, CHAMLAGAIN B, KOEHLER M, et al. Low-resistance 2D/2D ohmic contacts: A universal approach to high-performance WSe_2, MoS_2, and $MoSe_2$ transistors[J]. Nano Lett, 2016, 16(3): 1896–1902.

[9] CAHANGIROV S, TOPSAKAL M, AKTÜRK E, et al. Two and one dimensional honeycomb structures of silicon and germanium[J]. Phys Rev Lett, 2009, 102(23): 236804.

[10] ZHANG H, LI Y, HOU J, et al. Dirac state in the FeB_2 monolayer with graphene-like boron sheet[J]. Nano Lett, 2016, 16(10): 6124–6129.

[11] ADAMSKA L, SHARIFZADEH S. Fine-tuning the optoelectronic properties of freestanding borophene by strain[J]. ACS Omega, 2017, 2(11): 8290–8299.

[12] MD SAAD S K, ALI UMAR A, ALI UMAR M I, et al. Two-dimensional, hierarchical Ag-doped TiO_2 nanocatalysts: Effect of the metal oxidation state on the photocatalytic properties[J]. ACS Omega, 2018, 3(3): 2579–2587.

[13] ZHANG X, HUANG H, ZHANG Y, et al. Phase transition of two-dimensional β-Ga_2O_3 nanosheets from ultrathin γ-Ga_2O_3 nanosheets and their photocatalytic hydrogen evolution activities[J]. ACS Omega, 2018, 3(10): 14469–14476.

[14] GAIKWAD P V. Two-dimensional anisotropic C10 carbon allotrope with mechanically tunable band gap[J]. ACS Omega, 2019, 4(3): 5002–5011.

[15] TRUONG Q.D, KEMPAIAH DEVARAJU M, NAKAYASU Y, et al. Exfoliated MoS_2 and $MoSe_2$ nanosheets by a supercritical fluid process for a hybrid Mg–Li-ion battery[J]. ACS Omega, 2017, 2(5): 2360–2367.

[16] ZHAO X, YANG Q, ZHANG H, et al. Modulating electronic and magnetic properties of zigzag $MoSe_2$ nanoribbons with different edge structures[J]. Physica E, 2019, 109: 93–100.

[17] ZHANG H, ZHAO X, GAO Y, et al. Electronic and magnetic properties of $MoSe_2$ armchair nanoribbons controlled by the different edge structures[J]. Superlattices Microst, 2018, 115: 30–39.

[18] LI W, GUO M, ZHANG G, et al. Gapless MoS_2 allotrope possessing both massless dirac and heavy fermions[J]. Phys Rev B, 2014, 89(20): 205402.

[19] WANG N, CAO D, WANG J, et al. Semicon ducting edges and flake-shape evolution of monolayer GaSe: Role of edge reconstructions[J]. Nanoscale, 2018, 10(25): 12133–12140.

[20] BANDURIN D A, TYURNINA A V, YU G L, et al. High electron mobility, quantum hall effect and anomalous optical response in atomically thin InSe[J]. Nat Nanotechnol, 2017, 12(3): 223–227.

[21] FENG W, ZHEN W, CAO W, et al. Back gated multilayer InSe transistors with enhanced carrier mobilities *via* the suppression of carrier scattering from a dielectric interface[J]. Adv Mater, 2014, 26(38): 6587–6593.

[22] CHENG Y C, ZHU Z Y, TAHIR M, et al. Spin-orbit–induced spin splitting in polar transition metal dichalcogenide monolayers[J]. EPL, 2013, 102(5): 57001.

[23] YAO Q F, CAI J, TONG W Y, et al. Manipulation of the large rashba spin splitting in polar two-dimensional transition-metal dichalcogenides[J]. Phys Rev B, 2017, 95(16): 165401.

[24] LU A Y, ZHU H, XIAO J, et al. Janus monolayers of transition metal dichalcogenides[J]. Nat Nanotechnol, 2017, 12(8): 744–749.

[25] ZHANG J, JIA S, KHOLMANOV I, et al. Janus monolayer transition-metal dichalcogenides[J]. ACS Nano,2017, 11(8): 8192–8198.

[26] GUO Y, ZHOU S, BAI Y, et al. Enhanced piezoelectric effect in Janus group-III chalcogenide monolayers[J]. Appl Phys Lett, 2017, 110(16): 163102.

[27] LAASONEN K, CAR R, LEE C, et al. Implementation of ultrasoft pseudopotentials in Ab initio molecular dynamics[J]. Phys Rev B, 1991, 43(8): 6796–6799.

[28] KRESSE G. Efficient iterative schemes for Ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set[J]. Phys Rev B, 1996, 54(16): 11169–11186.

[29] MOBARAK M. Electrical and thermoelectric power measurements of $GaInSe_2$ single crystals[J]. Phys B, 2009, 404(8): 1259–1263.

[30] FREDERIC P M, AGNES F V, JOHN M. Anderson's Rule[M]. Saar brücken: Alphascript Publishing, 2011: 76.

[31] WANG Z, WU S F. Helmholtz equation–least-squares method for reconstructing the acoustic pressure field[J]. J Acoust Soc Am, 1997, 102(4), 2020–2032.