

# 基于GeC和WS<sub>2</sub>超晶格的第一性原理研究

何文海

上海理工大学理学院, 上海

收稿日期: 2024年4月22日; 录用日期: 2024年5月24日; 发布日期: 2024年5月31日

## 摘要

本文通过第一性原理研究了GeC/WS<sub>2</sub>超晶格结构, 利用密度泛函理论(DFT)和VASP软件包, 详细分析了GeC和WS<sub>2</sub>单层材料的电子性质, 并进一步探讨了GeC/WS<sub>2</sub>超晶格在六种不同堆叠方式下的原子结构和电子性质。计算结果显示六种堆叠结构均为II型能带排列的直接带隙半导体, 带隙大小在0.55 eV到1.03 eV之间变化。这表明构建超晶格可以通过改变堆叠方式来调控超晶格的电子性质。此外, 结合能和层间距的分析表明超晶格的物理稳定性与堆叠方式密切相关。这项研究不仅揭示了GeC/WS<sub>2</sub>超晶格在电子和光学性质调控方面的应用潜力, 也为设计和制备具有特定功能的新型超晶格材料提供了理论基础。

## 关键词

第一性原理, 超晶格, 堆叠方式, 能带结构, 态密度

# First-Principles Study Based on GeC and WS<sub>2</sub> Superlattices

Wenhai He

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

Received: Apr. 22<sup>nd</sup>, 2024; accepted: May 24<sup>th</sup>, 2024; published: May 31<sup>st</sup>, 2024

## Abstract

In this paper, the GeC/WS<sub>2</sub> superlattice structure is investigated by first principles, and the electronic properties of GeC and WS<sub>2</sub> monolayers are analyzed in detail by using density-functional theory (DFT) and the VASP software package, and the atomic structure and electronic properties of the GeC/WS<sub>2</sub> superlattice are further explored in six different stacking modes. The computational results show that all six stacked structures are direct bandgap semiconductors with type II energy band arrangement, and the bandgap size varies from 0.55 eV to 1.03 eV. This suggests that constructing superlattices can modulate the electronic properties of superlattices by changing the

stacking method. In addition, the analysis of binding energy and layer spacing indicates that the physical stability of the superlattice is closely related to the stacking mode. This study not only reveals the potential application of GeC/WS<sub>2</sub> superlattices in the modulation of electronic and optical properties, but also provides a theoretical basis for the design and preparation of novel superlattice materials with specific functions.

## Keywords

The First Principle Thinking, Superlattice, Stacking Method, Energy Band Structure, Density of States

Copyright © 2024 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

超晶格是一种由两种或多种不同材料周期性交替堆叠构成的复合结构，其层与层之间的厚度通常在纳米到微米范围[1] [2] [3] [4]。自 20 世纪 70 年代初由 Esaki 和 Tsu 首次提出以来，已成为半导体物理、材料科学和固体电子学等领域的研究热点[1]。此后研究人员发现可以通过构建超晶格结构来优化电子和声子的输运特性，从而提高材料的热电性能。例如，Whitlow [5]等人构建纳米级 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 超晶格，发现其具备高热电性能；Harman [2]等人通过构建 PbSeTe 量子点超晶格结构，发现与传统的热电材料(如块状 (Bi,Sb)<sub>2</sub>(Se,Te)<sub>3</sub>)相比，其具有更加优异的冷却效果。超晶格结构中的电子能够通过量子隧穿效应跨越势垒。例如，Esaki [1]等人研究发现超晶格结构中的电子在量子隧穿效应下更容易穿过势垒。超晶格还具备超高强度和延展性的优点。例如，Yang [3]等人研究发现在室温下通过引入纳米尺度无序界面(NDI)，使得 Ni<sub>43.9</sub>Co<sub>22.4</sub>Fe<sub>8.8</sub>Al<sub>10.7</sub>Ti<sub>11.7</sub>B<sub>2.5</sub> (原子下标数字为该原子数量的百分比)超晶格合金具有 1.6 GPa 的超高强度和 25% 的拉伸延展性。超晶格结构还可以用于调控材料的光学性质，比如通过改变超晶格的周期性和层间距，可实现对光学带隙的精确控制。例如，Gnutzmann [6]等人通过构建 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 超晶格结构，在硅基材料中实现直接光学跃迁；Wu [4]等人研究发现 Si/SiGe 超晶格纳米线具有优异物理特性，可以作为高效的光源和热电转换材料。综上所述，超晶格具备多种优异的电子和光学性质，使得其在纳米科技、热电材料、量子点超晶格和微电子工业中的研究领域变得更加广泛[1] [2] [3]。这些研究不仅展示了超晶格在改进现有技术方面的潜力，还指出了新的物理现象和新材料的开发可能性。

随着研究人员对超晶格的关注度增加，其制备方法也越来越多。例如，通过分子束外延(MBE)技术或者化学气相沉积法(CVD)制备超晶格[7]，这是一种可以在原子级别精确控制薄膜生长的技术；通过再结晶技术可以制备出具有高纯度和均匀尺寸的纳米晶硅超晶格，这些超晶格在室温下表现出显著的光致发光效应[8]；混合脉冲激光烧蚀和化学气相沉积(PLA-CVD)的方法可以制备具有周期性纵向异质结构的单晶纳米线[4]；Dressick 等人通过 Langmuir-Blodgett 技术成功制备有机分子和金属纳米粒子的超晶格[9]。这些方法能够精确控制超晶格中材料之间的距离和交替顺序[7]，从而制备出具有特定电子性质的超晶格。

超晶格技术从理论提出到材料开发，再到功能性设备的实现。这一过程展示了半导体科技和纳米技术领域的快速进步和多学科融合的特点，显示了超晶格在现代材料科学中的重要地位和广阔的应用前景。本文将以前单层 GeC 和 WS<sub>2</sub> 为基础构建 GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格，利用基于密度泛函理论的第一性原理，计算并研究 GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格六种堆叠方式的原子结构和电子性质。

## 2. 计算方法

本文通过使用基于密度泛函理论[10] [11]的 VASP 软件包进行了模拟计算。VASP 软件包是维也纳大学 Hafner 开发的采用 Linux 或 Unix 操作系统基于密度泛函理论的计算软件。它利用密度泛函理论和交换关联泛函等方法求解 Schrödinger 方程,从而得出多粒子体系的能量、电荷密度等电子性质。通过求解 Schrödinger 方程来了解微观系统的性质被称为第一性原理(First Principle)。在进行 VASP 计算时,需要准备四个输入文件:多粒子体系结构参数文件(POSCAR)、粒子的赝势文件(POTCAR)、VASP 计算参数文件( INCAR)、计算时所设置的高对称点文件(KPOINTS)。

在模拟计算时,我们使用广义梯度近似(GGA)和 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)交换关联函数(GGA-PBE)描述了交换相关效应[12] [13]。为了更好的描述层间范德华相互作用,使用 DFT-D3 方法[14]进行校正。在单层材料计算中,对于布里渊区域,采用  $21 \times 21 \times 1$  Monkhorst-Pack 网格进行采样,在“z”方向上设置 20 Å 的真空层,以尽量减少相邻层和掺杂原子因周期性排列而造成的影响。在超晶格材料计算中,对于布里渊区域,采用  $21 \times 21 \times 6$  Monkhorst-Pack 网格进行采样。计算的平面波截止能量设置为 550 eV。为了确保所有原子位置的完全松弛和原子结构的彻底优化,能量和力的收敛标准分别设置  $10^{-6}$  eV 和 0.01 eV/Å。此计算方法在处理复杂材料体系时已证明具有较高的可靠性和准确性[11]。

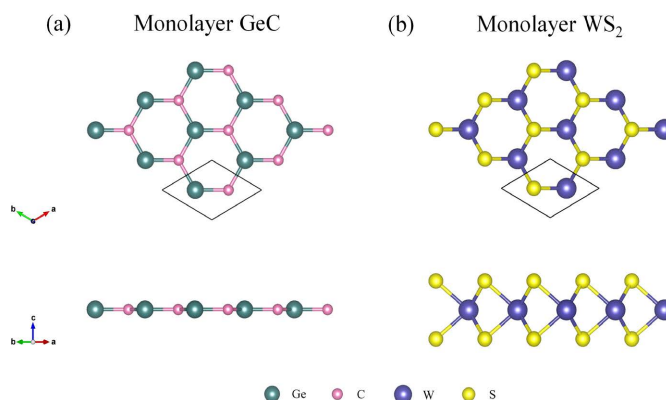
构建异质双层结构所需的结合能计算方法为:

$$E_b = E_{GeC/WS_2} - (E_{GeC} + E_{WS_2}) \quad (3.1)$$

其中  $E_b$  为体系的结合能,  $E_{GeC/WS_2}$  为 GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格的总能量,  $E_{GeC}$ 、 $E_{WS_2}$  分别代表 GeC、WS<sub>2</sub> 超晶格的总能量。

## 3. 结果分析

### 3.1. 单层 WS<sub>2</sub> 和 GeC 的原子结构和电子性质

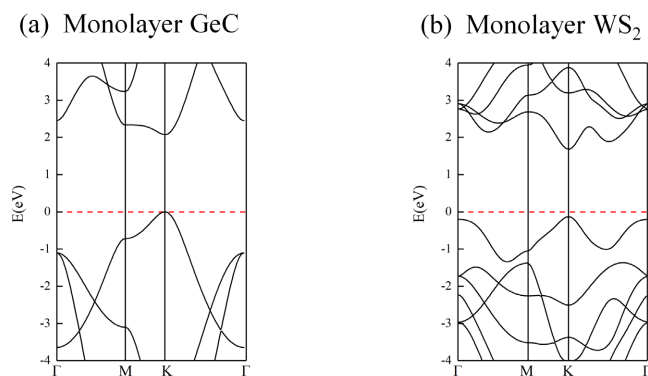


**Figure 1.** (a) Atomic structure diagram of GeC; (b) Atomic structure diagram of monolayer WS<sub>2</sub>

**图 1.** (a) GeC 的原子结构图; (b) 单层 WS<sub>2</sub> 的原子结构图

单层碳化锗(GeC)为 IVA 族化合物,由 Ge 原子和 C 原子构成,锗碳比为 1:1,其原子结构如图 1(a)所示。我们对  $1 \times 1 \times 1$  的 GeC 进行了结构优化,优化后得到的晶格常数  $a = b = 3.26$  Å,碳原子与锗原子的键长为 1.88 Å。通过模拟计算, $1 \times 1 \times 1$  的 GeC 是一种带隙值为 2.07 eV 的直接带隙半导体,其中价带顶和导带底皆位于高对称 K 点,如图 2(a)所示。作为过渡金属硫族化合物(TMDs)的典型例子,单层二硫化钨(WS<sub>2</sub>)的晶体结构由两层 S 原子和夹在中间的过渡金属 W 原子构成,其原子结构如图 1(b)所示。为了后续的计算,

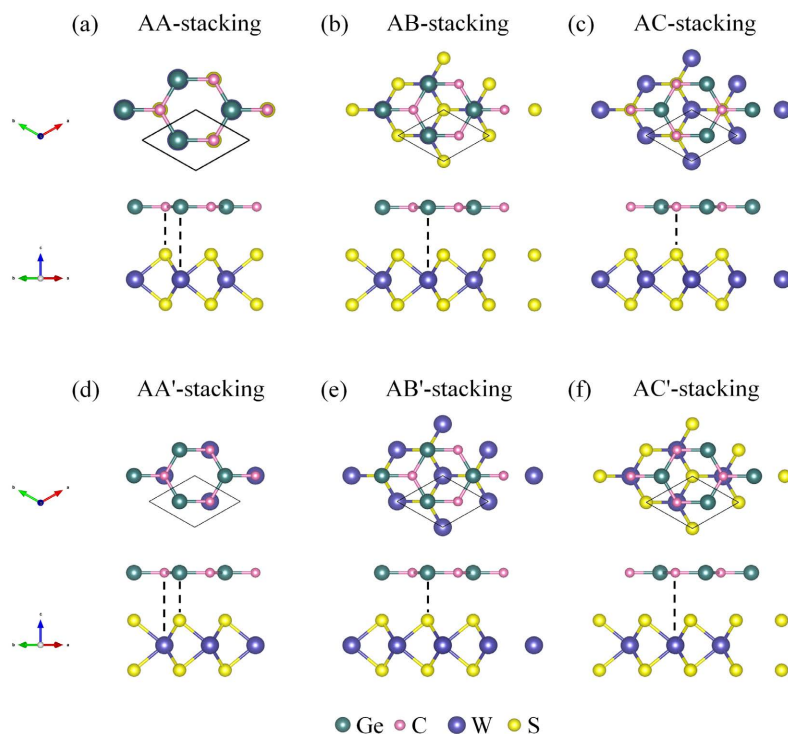
我们对  $1 \times 1 \times 1$  的  $\text{WS}_2$  进行了结构优化。优化后得到的晶格常数  $a = b = 3.18 \text{ \AA}$ ，W 原子与 S 原子的键长为  $2.41 \text{ \AA}$ ，S-W-S 构成的键角为  $81.06^\circ$ ，层厚度为  $3.14 \text{ \AA}$ 。通过模拟计算发现， $1 \times 1 \times 1$  的  $\text{WS}_2$  是一种带隙值为  $1.81 \text{ eV}$  的直接带隙半导体，其中价带顶 (Valence Band Maximum) 和导带底 (Conduction Band minimum) 皆处于高对称 K 点，如图 2(b) 所示。经计算后得到的数据与前人研究数据一致 [15] [16]。



**Figure 2.** (a) Energy band structure diagram of GeC; (b) Energy band structure diagram of monolayer  $\text{WS}_2$

**图 2.** (a) GeC 的能带结构图; (b) 单层  $\text{WS}_2$  的能带结构图

### 3.2. $\text{GeC}/\text{WS}_2$ 超晶格的原子结构信息



**Figure 3.** Side and top views of the atomic structure of  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  superlattice in six stacking modes (a) AA-stacking; (b) AB-stacking; (c) AC-stacking; (d) AA'-stacking; (e) AB'-stacking; (f) AC'-stacking

**图 3.**  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  超晶格的六种堆叠方式原子结构的侧视图和俯视图 (a) AA-stacking; (b) AB-stacking; (c) AC-stacking; (d) AA'-stacking; (e) AB'-stacking; (f) AC'-stacking

单层  $\text{WS}_2$  和  $\text{GeC}$  具有相同的六角结构，晶格常数分别为  $3.18 \text{ \AA}$  和  $3.26 \text{ \AA}$ ，如图 1 所示。那么我们在垂直方向反复堆叠单层  $\text{WS}_2$  和  $\text{GeC}$  材料，从而构建出  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  超晶格，其晶格失配率仅为 2.28%， $\text{WS}_2$  和  $\text{GeC}$  材料比为 1:1，如图 3 所示。根据原子对齐方式堆叠，我们得到六种不同的堆叠方式。其中图 3(a) AA-stacking 指在“z”方向上 Ge 原子和 W 原子对齐，C 原子和 S 原子对齐；图 3(b) AB-stacking 指在“z”方向上 Ge 原子和 W 原子对齐，C 原子和 S 原子分别对应  $\text{WS}_2$  和  $\text{GeC}$  材料层的六角中心位；图 3(c) AC-stacking 指在“z”方向上 C 原子和 S 原子对齐，Ge 原子和 W 原子分别对应  $\text{WS}_2$  和  $\text{GeC}$  材料层的六角中心位；将 AA-stacking、AB-stacking、AC-stacking 以  $\text{WS}_2$  材料层的六角中心位为圆心，绕“z”轴旋转  $60^\circ$  就可以得到图 3(d) AA'-stacking、(e) AB'-stacking、(f) AC'-stacking。

我们对这六种堆叠方式进行了结构优化，优化后的晶格常数，Ge-C 和 W-S 键长( $d_{\text{Ge-C}}$ ,  $d_{\text{W-S}}$ )，层间距  $h$  以及结合能  $E_b$  如表 1 所示。从表中数据上我们可以发现，经过优化后六种堆叠方式的晶格常数在  $3.215 \text{ \AA}$  和  $3.219 \text{ \AA}$  之间。相比单层  $\text{GeC}$ 、 $\text{WS}_2$ ， $1 \times 1 \times 1$  的  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  超晶格的  $\text{GeC}$  材料层被压缩了 1.32% 左右， $\text{WS}_2$  材料层被拉伸了 1.16% 左右。其中 AB'-stacking 堆叠方式的晶格常数( $3.219 \text{ \AA}$ )最大，AC-stacking 堆叠方式的晶格常数( $3.215 \text{ \AA}$ )最小。六种堆叠方式的 Ge-C 键在  $1.857 \text{ \AA}$  左右，W-S 键长在  $2.422 \text{ \AA}$  左右。与单层  $\text{GeC}$  和  $\text{WS}_2$  相比，六种堆叠方式的 Ge-C 键长被压缩了 1.22% 左右，W-S 键长被拉伸了 0.50% 左右。我们还计算了六种堆叠方式的结合能  $E_b$ ，发现所有堆叠方式的结合能都较小，表明杂化体系存在弱相互作用。不同构型之间的差异也反映在超晶格的层间距  $h$  上，其中六种堆叠方式的层间距离范围为  $3.324 \text{ \AA}$  至  $3.736 \text{ \AA}$ 。我们可以发现层间距离和结合能随堆积模型的不同而不同。其中最稳定的叠加模型层间距离最短，说明相邻两层之间存在较强的物理相互作用。从表 1 中可以看出，这些  $\text{WS}_2/\text{GeC}$  超晶格中最稳定的模型是 AB-stacking 堆叠方式。

**Table 1.** Lattice constants ( $a$ ), layer spacing ( $h$ ), bond lengths ( $d_{\text{Ge-C}}$ ,  $d_{\text{W-S}}$ ), and binding energies ( $E_b$ ) of the  $1 \times 1 \times 1$   $\text{GeC}/\text{WS}_2$  superlattice

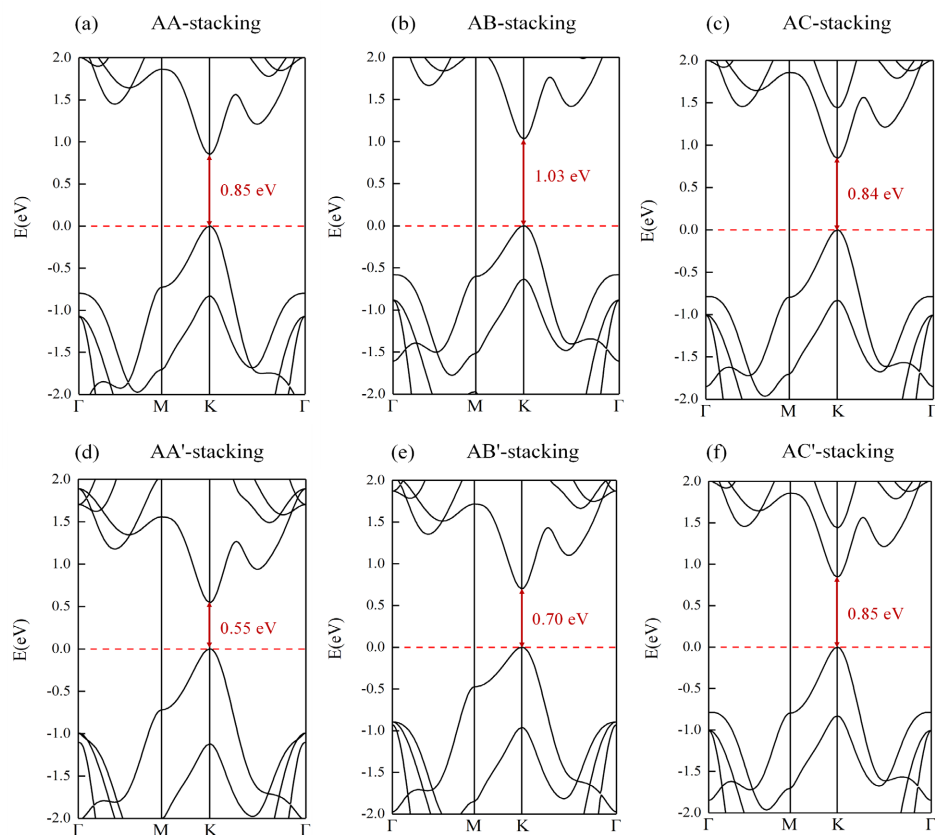
**表 1.**  $1 \times 1 \times 1$  的  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  超晶格的晶格常数( $a$ )、层间距( $h$ )、键长( $d_{\text{Ge-C}}$ ,  $d_{\text{W-S}}$ )以及结合能( $E_b$ )

堆叠方式	$a = b$ ( $\text{\AA}$ )	$d_{\text{Ge-C}}$ ( $\text{\AA}$ )	$d_{\text{W-S}}$ ( $\text{\AA}$ )	$h$ ( $\text{\AA}$ )	$E_b$ (eV)
AA-stacking	3.215	1.856	2.422	3.683	-0.589
AA'-stacking	3.218	1.858	2.422	3.390	-0.677
AB-stacking	3.218	1.858	2.422	3.324	-0.695
AB'-stacking	3.219	1.858	2.421	3.456	-0.650
AC-stacking	3.215	1.856	2.422	3.736	-0.575
AC'-stacking	3.216	1.857	2.422	3.363	-0.692

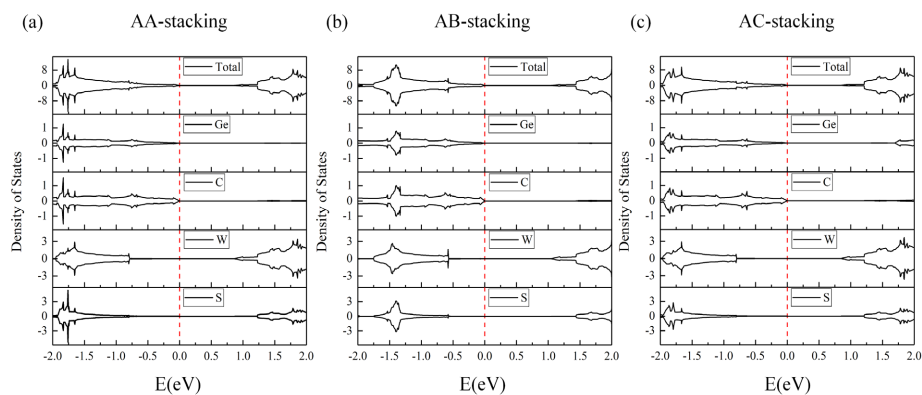
### 3.3. $\text{GeC}/\text{WS}_2$ 超晶格的电子性质

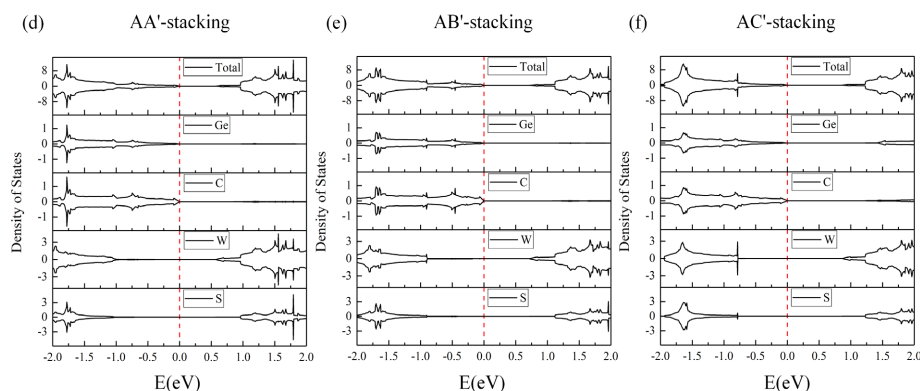
根据能带排列我们可以把能带分为 I 型(type-I)能带排列(价带顶和导带底由同一材料层贡献)和 II 型(type-II)能带特性(价带顶和导带底分别由不同材料层贡献) [17] [18]; 我们还对六种堆叠方式进行能带结构和态密度(Density of States)计算，如图 4、图 5 所示。从能带图中我们发现六种堆叠方式的  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  超晶格均为无磁性直接带隙半导体，其中价带顶和导带底均位于高对称 K 点。其中图 4(a) AA-stacking 堆叠方式的  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  超晶格具有  $0.85 \text{ eV}$  的带隙值、(b) AB-stacking 堆叠方式的  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  超晶格具有  $1.03 \text{ eV}$  的带隙值、(c) AC-stacking 堆叠方式的  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  超晶格具有  $0.84 \text{ eV}$  的带隙值、(d) AA'-stacking 堆叠方式的  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  超晶格具有  $0.55 \text{ eV}$  的带隙值、(e) AB'-stacking 堆叠方式的  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  超晶格具有  $0.70 \text{ eV}$  的带隙值、(f) AC'-stacking 堆叠方式的  $\text{GeC}/\text{WS}_2$  超晶格具有  $0.85 \text{ eV}$  的带隙值。当堆叠方式发生改变，

其体系的能带结构也会发生改变。相比单层 GeC、WS<sub>2</sub> 材料，构建的 GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格的带隙性质虽然没有改变，但是带隙值减小，这使得电子从价带向导带跃迁时所需要的能量减少，提高了载流子迁移率。因此，我们在构建超晶格结构时可以通过不同的堆叠方式有效地调控体系的电子性质。从图 5 我们可以看出，不同堆叠方式其态密度大小也不相同，并且六种堆叠体系的态密度与其能带结构是相对应的。结合能带结构和态密度图，我们可以发现六种堆叠方式的 GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格的价带顶主要由 C 原子贡献，导带底主要由 W 原子贡献。因此，六种堆叠方式的 GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格的能带结构具有 II 型能带排列。



**Figure 4.** Energy band structure diagrams of GeC/WS<sub>2</sub> superlattice with six stacking modes (a) AA-stacking; (b) AB-stacking; (c) AC-stacking; (d) AA'-stacking; (e) AB'-stacking; (f) AC'-stacking  
**图 4.** GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格的六种堆叠方式的能带结构图(a) AA-stacking; (b) AB-stacking; (c) AC-stacking; (d) AA'-stacking; (e) AB'-stacking; (f) AC'-stacking





**Figure 5.** Density of states (DOS) plots for six stacking modes of GeC/WS<sub>2</sub> superlattices (a) AA-stacking; (b) AB-stacking; (c) AC-stacking; (d) AA'-stacking; (e) AB'-stacking; (f) AC'-stacking  
**图 5.** GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格的六种堆叠方式的态密度(DOS)图(a) AA-stacking; (b) AB-stacking; (c) AC-stacking; (d) AA'-stacking; (e) AB'-stacking; (f) AC'-stacking

## 4. 结论

本文以单层 GeC 和 WS<sub>2</sub> 为基础构建 GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格, 并模拟计算了  $1 \times 1 \times 1$  GeC、 $1 \times 1 \times 1$  WS<sub>2</sub>、 $1 \times 1$  GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格的电子性质。对 GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格的 6 种堆叠方式的结合能进行了计算, 得到最稳定的模型为 AB-stacking。GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格的六种堆叠结构的带隙值在至 0.55 eV 至 1.03 eV 之间。相比单层 GeC 和 WS<sub>2</sub>, GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格带隙值减小, 说明电子跃迁时所需要的能量减小, 有利于电子-空穴对的产生, 对开发新型光电子和热电材料极具意义。GeC/WS<sub>2</sub> 超晶格的六种堆叠结构具有不同的能带结构, 但均具有 II 型能带排列特性, 说明可以通过改变堆叠方式的方法调节材料的电子性质, 使得能够针对特定应用优化材料性能, 并为未来超晶格材料的设计和应用提供了理论基础和指导。

## 参考文献

- [1] Tsu, R. and Esaki, L. (1973) Tunneling in a Finite Superlattice. *Applied Physics Letters*, **22**, 562-564. <https://doi.org/10.1063/1.1654509>
- [2] Harman, T.C., Taylor, P.J., Walsh, M.P., *et al.* (2002) Quantum Dot Superlattice Thermoelectric Materials and Devices. *Science*, **297**, 2229-2232. <https://doi.org/10.1126/science.1072886>
- [3] Yang, T., Zhao, Y.L., Li, W.P., *et al.* (2020) Ultrahigh-Strength and Ductile Superlattice Alloys with Nanoscale Disordered Interfaces. *Science*, **369**, 427-432. <https://doi.org/10.1126/science.abb6830>
- [4] Wu, Y.Y., Fan, R. and Yang, P.D. (2002) Block-by-Block Growth of Single-Crystalline Si/SiGe Superlattice Nanowires. *Nano Letters*, **2**, 83-86. <https://doi.org/10.1021/nl0156888>
- [5] Whitlow, L.W. and Hirano, T. (1995) Superlattice applications to thermoelectricity. *Journal of Applied Physics*, **78**, 5460-5466. <https://doi.org/10.1063/1.359661>
- [6] Gnuzmann, U. and Clausecker, K. (1974) Theory of Direct Optical Transitions in an Optical Indirect Semiconductor with a Superlattice Structure. *Applied Physics*, **3**, 9-14. <https://doi.org/10.1007/BF00892328>
- [7] Sai-Halasz, G.A., Tsu, R. and Esaki, L. (1977) A New Semiconductor Superlattice. *Applied Physics Letters*, **30**, 651-653. <https://doi.org/10.1063/1.89273>
- [8] Tsybeskov, L., Hirschman, K.D., Dutttagupta, S.P., *et al.* (1998) Nanocrystalline-Silicon Superlattice Produced by Controlled Recrystallization. *Applied Physics Letters*, **72**, 43-45. <https://doi.org/10.1063/1.120640>
- [9] Schmitt, J., Decher, G., Dressick, W.J., *et al.* (1997) Metal Nanoparticle/Polymer Superlattice Films: Fabrication and Control of Layer Structure. *Advanced Materials*, **9**, 61-65. <https://doi.org/10.1002/adma.19970090114>
- [10] (1983) Density Functional Theory.
- [11] Hafner, J. (2008) Ab-Initio Simulations of Materials Using VASP: Density-Functional Theory and Beyond. *Journal of Computational Chemistry*, **29**, 2044-2078. <https://doi.org/10.1002/jcc.21057>

- 
- [12] Perdew, J.P., Tao, J.M., Staroverov, V.N., *et al.* (2004) Meta-Generalized Gradient Approximation: Explanation of a Realistic Nonempirical Density Functional. *Journal of Chemical Physics*, **120**, 6898-6911. <https://doi.org/10.1063/1.1665298>
- [13] Ziesche, P., Kurth, S. and Perdew, J.P. (1998) Density Functionals from LDA to GGA. *Computational Materials Science*, **11**, 122-127. [https://doi.org/10.1016/S0927-0256\(97\)00206-1](https://doi.org/10.1016/S0927-0256(97)00206-1)
- [14] Cutini, M., Maschio, L. and Ugliengo, P. (2020) Exfoliation Energy of Layered Materials by DFT-D: Beware of Dispersion! *Journal of Chemical Theory and Computation*, **16**, 5244-52. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00149>
- [15] Kumar, V., Mishra, R.K., Kumar, P., *et al.* (2023) Electronic and Optical Properties of Nb/V-Doped WS<sub>2</sub> Monolayer: A First-Principles Study. *Luminescence*, **38**, 1215-1220. <https://doi.org/10.1002/bio.4342>
- [16] Vu, T.V., Nguyen Thi Tuyet, A., Duy Phu, T., *et al.* (2020) Surface Functionalization of GeC Monolayer with F and Cl: Electronic and Optical Properties. *Superlattices and Microstructures*, **137**, Article ID: 106359. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.106359>
- [17] Ozcelik, V.O., Azadani, J.G., Yang, C., *et al.* (2016) Band Alignment of Two-Dimensional Semiconductors for Designing Heterostructures with Momentum Space Matching. *Physical Review B*, **94**, Article 035125. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.035125>
- [18] Xia, C., Xiong, W., Du, J., *et al.* (2018) Type-I Transition Metal Dichalcogenides Lateral Homojunctions: Layer Thickness and External Electric Field Effects. *Small*, **14**, Article ID: 1800365. <https://doi.org/10.1002/sml.201800365>