

# 《二维范德华异质结 $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ ( $X = \text{Bi}, \text{Sb}$ ) 的光电性能\*》 的补充材料

熊祥杰<sup>1)</sup> 钟防<sup>1)</sup> 张资文<sup>1)</sup> 陈芳<sup>1)</sup> 罗婧澜<sup>2)</sup>

赵宇清<sup>1)†</sup> 朱慧平<sup>3)‡</sup> 蒋绍龙<sup>4)††</sup>

- 1) (湖南科技大学物理与电子科学学院, 智能传感器与新型传感器材料湖南省重点实验室, 湘潭 411201)
- 2) (格拉斯哥大学亚当史密斯学院, 格拉斯哥 G12 8QQ)
- 3) (中国科学院微电子研究所, 硅器件技术重点实验室, 北京 100029)
- 4) (粤港澳大湾区(广东)量子科学中心, 深圳 518045)

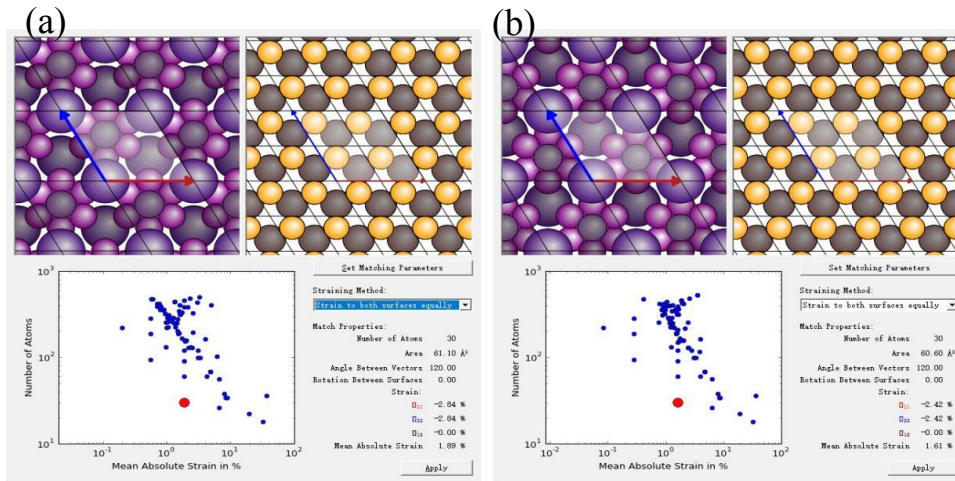


图 S1 (a)  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  和(b)  $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  的晶格失配比图

Fig. S1. Lattice mismatch ratios of (a)  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  and (b)  $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$ .

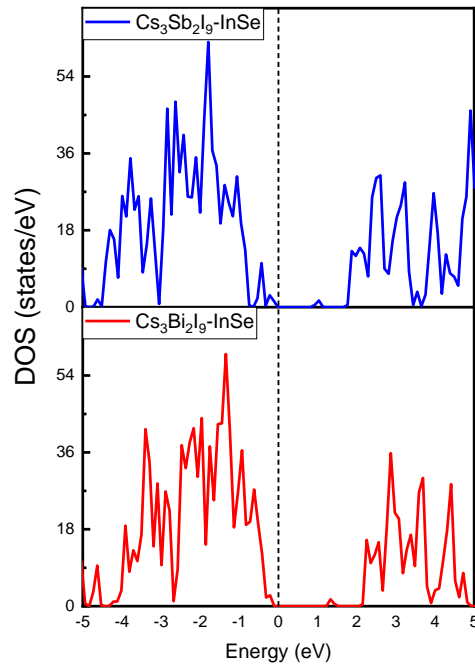


图 S2 二维  $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9\text{-InSe}$  异质结的态密度图

Fig. S2. Density of states of 2D  $\text{Cs}_3\text{X}_2\text{I}_9\text{-InSe}$  heterostructure.

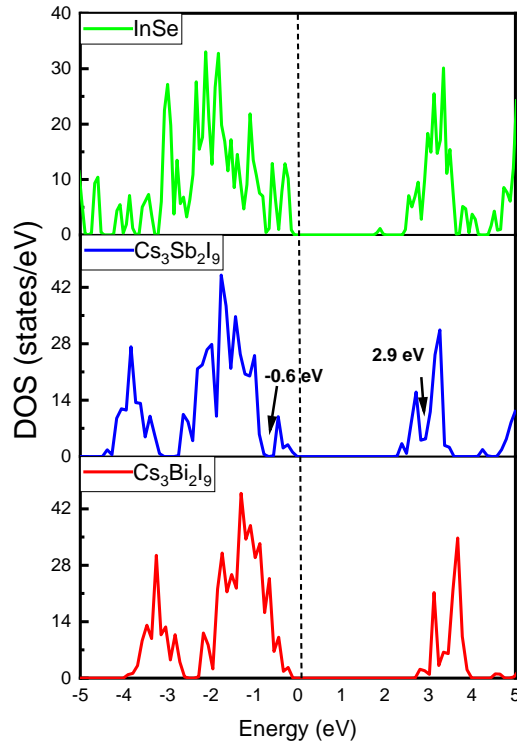


图 S3 单体结构  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$ ,  $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9$  和  $\text{InSe}$  的态密度图

Fig. S3. Density of states of free-standing monolayer  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$ ,  $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9$  and  $\text{InSe}$ .

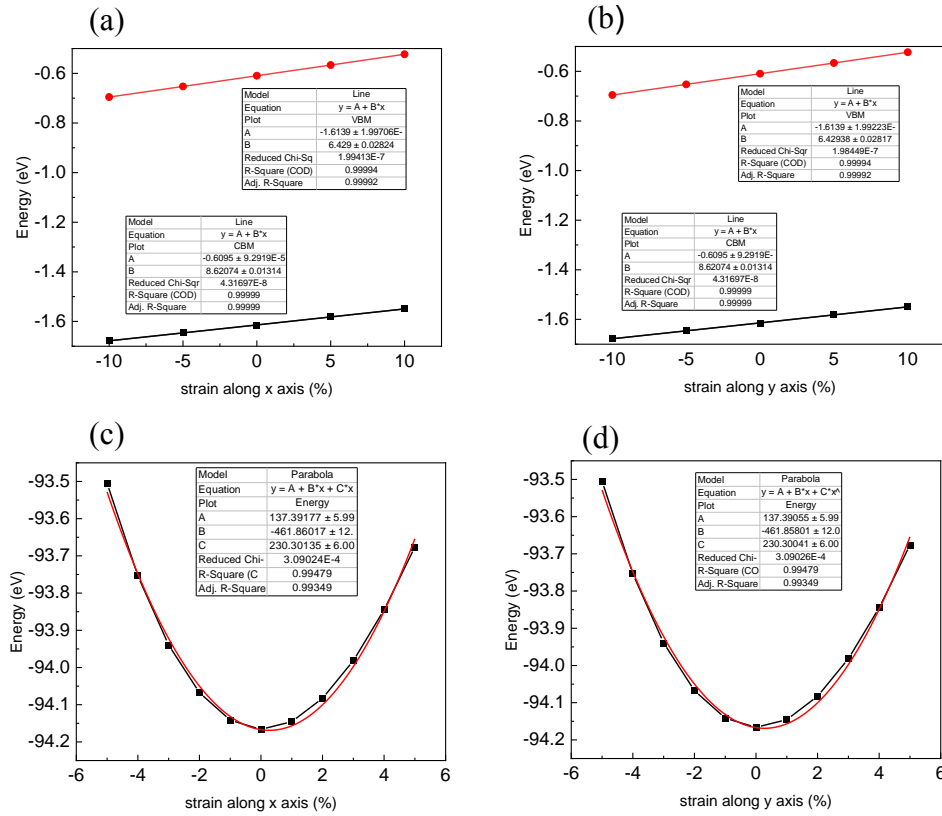


图 S4 沿(a)  $x$  轴和(b)  $y$  轴方向的二维  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  的导带底(CBM)和价带顶(VBM)随晶格形变的线性拟合; 二维  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  总能量与沿(c)  $x$  轴和(d)  $y$  轴方向晶格形变的二阶抛物线拟合

Fig. S4. Linear fits of the conduction band minimum (CBM) and valence band maximum (VBM) of 2D  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  along (a)  $x$ -axis and (b)  $y$ -axis directions with lattice deformation. Parabolic fits of the total energy of 2D  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  along (c)  $x$ -axis and (d)  $y$ -axis directions with lattice deformation.

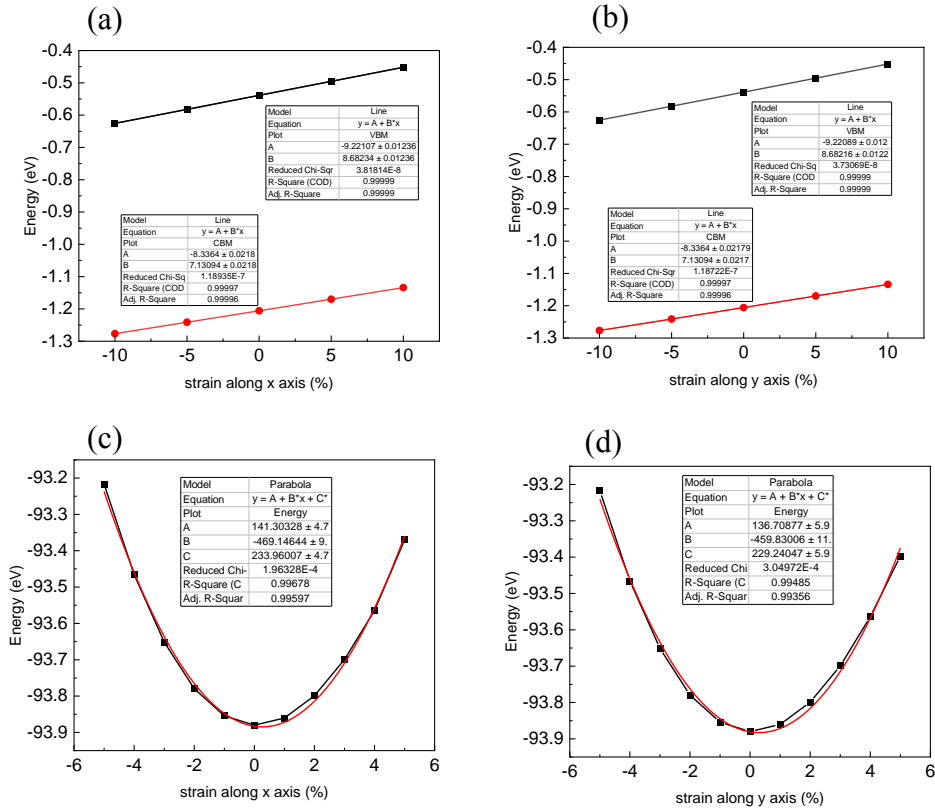


图 S5 沿(a)  $x$  轴和(b)  $y$  轴方向的二维  $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  的导带底(CBM)和价带顶(VBM)随晶格形变的线性拟合. 二维  $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  总能量与沿(c)  $x$  轴和(d)  $y$  轴方向晶格形变的二阶抛物线拟合

Fig. S5. Linear fits of the conduction band minimum (CBM) and valence band maximum (VBM) of 2D  $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  along (a)  $x$ -axis and (b)  $y$ -axis directions with lattice deformation. Parabolic fits of the total energy of 2D  $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  along (c)  $x$ -axis and (d)  $y$ -axis directions with lattice deformation.

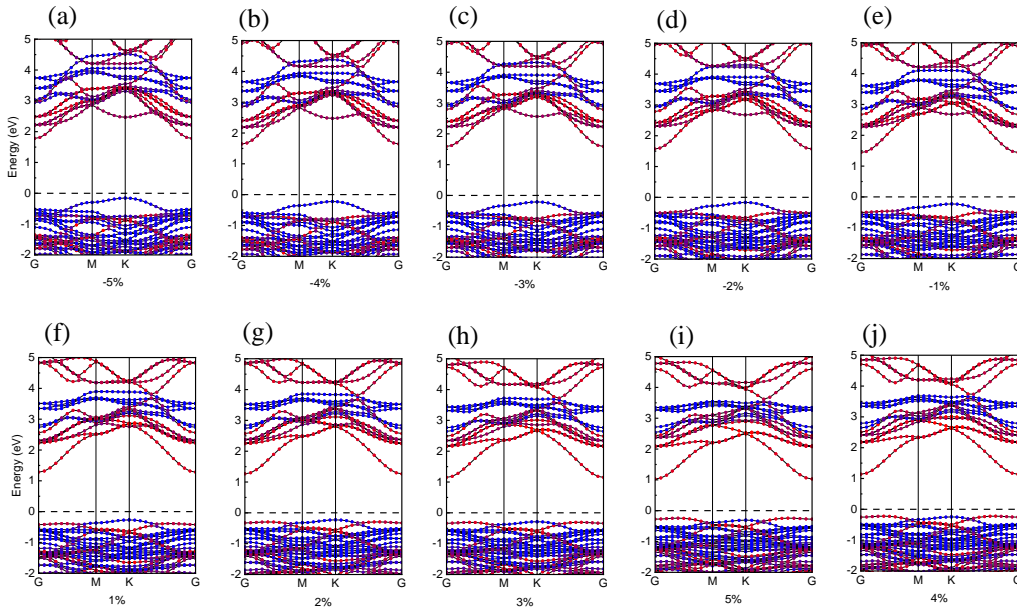


图 S6 (a)  $-5\%$ , (b)  $-4\%$ , (c)  $-3\%$ , (d)  $-2\%$ , (e)  $-1\%$ , (f)  $+1\%$ , (g)  $+2\%$ , (h)  $+3\%$ , (i)  $+4\%$ , (j)  $+5\%$  双轴应变下的二维  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  异质结的能带结构

Fig. S6. Band structures of 2D  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  heterostructure under (a)  $-5\%$ , (b)  $-4\%$ , (c)  $-3\%$ , (d)  $-2\%$ , (e)  $-1\%$ , (f)  $+1\%$ , (g)  $+2\%$ , (h)  $+3\%$ , (i)  $+4\%$ , (j)  $+5\%$  biaxial strain.

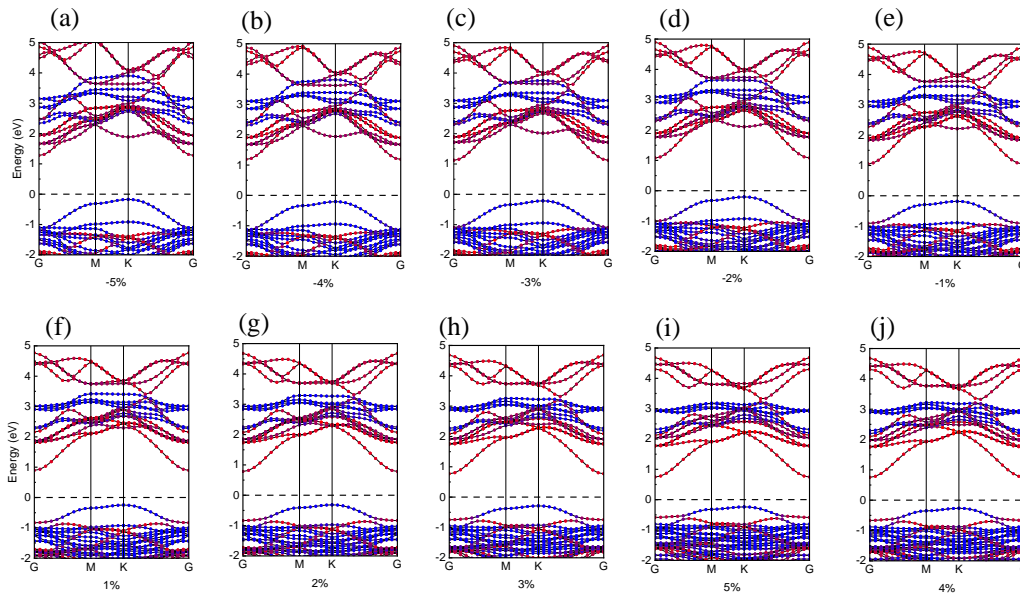


图 S7 (a)  $-5\%$ , (b)  $-4\%$ , (c)  $-3\%$ , (d)  $-2\%$ , (e)  $-1\%$ , (f)  $+1\%$ , (g)  $+2\%$ , (h)  $+3\%$ , (i)  $+4\%$ , (j)  $+5\%$  双轴应变下的的二维  $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  异质结的能带结构

Fig. S7. Band structures of 2D  $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9/\text{InSe}$  heterostructure under (a)  $-5\%$ , (b)  $-4\%$ , (c)  $-3\%$ , (d)  $-2\%$ , (e)  $-1\%$ , (f)  $+1\%$ , (g)  $+2\%$ , (h)  $+3\%$ , (i)  $+4\%$ , (j)  $+5\%$  biaxial strain.