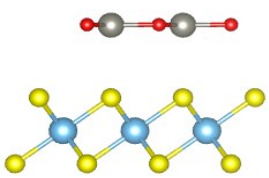
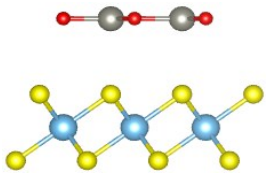
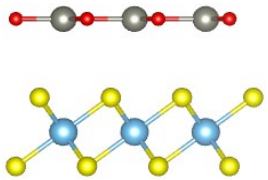
Electronic Supplementary Material (ESI) for Physical Chemistry Chemical Physics.

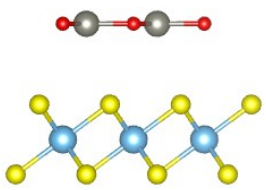
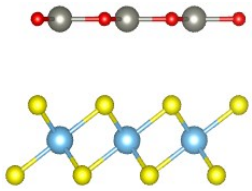
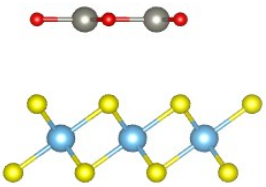
Electronic supplementary information for

"Tunable electronic properties of the novel g-ZnO/1T-TiS_2 vdW heterostructure by electric field and strain: crossovers in bandgap and band alignment types"

Kourosh Rahimi*
Condensed Matter Group, Department of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Jalal-Ale-Ahmad Avenue, Tehran, Iran
* Corresponding author: kourosh.e.rahimi@gmail.com

The optimized unit cell parameters (PRIMVEC) and the atomic positions (PRIMCOORD) of the six stacking patterns considered in this work as written in .xsf format are given below:

Stacking pattern	xsf file content
	CRYSTAL PRIMVEC 3.3895887331 -0.0000000000 0.0000000000 -1.6947960633 2.9354699484 0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000 19.9999923284 PRIMCOORD 5 1 S -0.0000000006 1.9569799711 11.3723042960 Ti 0.0000000000 0.0000000000 9.9185981571 S 1.6947943705 0.9784899841 8.4666766377 Zn -0.0000000006 1.9569799711 14.5612668605 O 1.6947943705 0.9784899841 14.5838066130
	CRYSTAL PRIMVEC 3.3885333690 -0.0000000000 0.0000000000 -1.6942666845 2.9345537158 0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000 19.9999923284 PRIMCOORD 5 1 S -0.0000000017 1.9563698778 11.3299184100 Ti 0.0000000000 0.0000000000 9.8759199913 S 1.6942660143 0.9781849375 8.4237540319 Zn -0.0000000017 1.9563698778 14.6299641978 O 0.0000000000 0.0000000000 14.6430959134
	CRYSTAL PRIMVEC 3.3871318725 0.0000000000 0.0000000000 -1.6935642395 2.9333422528 0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000 19.9999923284 PRIMCOORD 5 1 S -0.0000000017 1.9555609983 11.3272406109 Ti 0.0000000000 0.0000000000 9.8708019530 S 1.6935655036 0.9777804977 8.4156825146 Zn 0.0000000000 0.0000000000 14.6418053738 O 1.6935655036 0.9777804977 14.6471220921

	CRYSTAL PRIMVEC 3.3883060075 -0.0000000000 0.0000000000 -1.6941547005 2.9343602890 0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000 19.9999923284 PRIMCOORD 5 1 S -0.0000000028 1.9562395737 11.3104529965 Ti 0.0000000000 0.0000000000 9.8547123983 S 1.6941531661 0.9781197854 8.4001651397 Zn 1.6941531661 0.9781197854 14.6664730457 O 0.0000000000 0.0000000000 14.6708489642
	CRYSTAL PRIMVEC 3.3854249652 -0.0000000000 0.0000000000 -1.6927124826 2.9318627069 0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000 19.9999923284 PRIMCOORD 5 1 S -0.0000000017 1.9545758086 11.2244498049 Ti 0.0000000000 0.0000000000 9.7690277466 S 1.6927123044 0.9772879028 8.3134047884 Zn 0.0000000000 0.0000000000 14.7952578831 O -0.0000000017 1.9545758086 14.8005123213
	CRYSTAL PRIMVEC 3.3855742772 0.0000000000 0.0000000000 -1.6927871386 2.9319916581 0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000 19.9999923284 PRIMCOORD 5 1 S -0.0000000028 1.9546617919 11.2171085474 Ti 0.0000000000 0.0000000000 9.7624379888 S 1.6927867681 0.9773308945 8.3073976304 Zn 1.6927867681 0.9773308945 14.8041674201 O -0.0000000028 1.9546617919 14.8115409577

A typical input for variable-cell relaxation for quantum espresso is given below:

```
&CONTROL
                    title = '1T-TiS2-ZnO' ,
                calculation = 'vc-relax' ,
               restart_mode = 'from_scratch' ,
                 wf_collect = .true. ,
                     outdir = 'tmp' ,
                     wfcdir = 'wfc' ,
                 pseudo_dir = 'pseudo' ,
                  verbosity = 'high' ,
                      nstep = 200 ,
/
&SYSTEM
                      ibrav = 4,
                          A = 3.393455 ,
                          C = 20 ,
                        nat = 5,
                       ntyp = 4,
                    ecutwfc = 8.0000000000d+01 ,
                       nbnd = 33,
                  input_dft = "vdw-df" ,
               occupations = 'fixed' ,
```

```
/
 &ELECTRONS
            electron_maxstep = 200,
                    conv_thr = 1.d-10 ,
                mixing_beta = 0.4 ,
 /
 &IONS
 /
 &CELL
                cell_dofree = '2Dxy' ,
 /
ATOMIC_SPECIES
    S   32.06600  S_ONCV_PBE_sr.upf
   Ti   47.86700  Ti_ONCV_PBE_sr.upf
   Zn   65.39000  Zn_ONCV_PBE_sr.upf
    O   15.99940  O_ONCV_PBE_sr.upf
ATOMIC_POSITIONS crystal
    S      0.333333333    0.666666667    0.572566801
   Ti      0.000000000    0.000000000    0.500000000
    S      0.666666667    0.333333333    0.427433199
   Zn      0.333333333    0.666666667    0.722566801
    O      0.666666667    0.333333333    0.722566801
K_POINTS automatic
  12 12 1   0 0 0
```

A typical input for Wannier90 to calculate band structures is given below:

```
num_wann        = 33
num_bands       = 33
dis_num_iter    = 400
num_iter        = 400
conv_tol        = 1.0E-10
dis_conv_tol    = 1.0E-10

begin atoms_frac
    S      0.333333333    0.666666667    0.568615403
   Ti      0.000000000    0.000000000    0.495930072
    S      0.666666667    0.333333333    0.423333972
   Zn      0.333333333    0.666666667    0.728063584
    O      0.666666667    0.333333333    0.729190572
end atoms_frac

auto_projections = .true.
fermi_energy = -0.6169
bands_plot = .true.
wannier_plot = true

begin unit_cell_cart
bohr
6.4053965304   0       0
-3.202698262   5.5472361185   0
0       0       37.7945226298
end_unit_cell_cart

begin kpoint_path
G  0.000000000    0.000000000    0.000000000  M  0.500000000    0.000000000    0.000000000
M  0.500000000    0.000000000    0.000000000  K  0.333330000    0.333330000    0.000000000
K  0.333330000    0.333330000    0.000000000  G  0.000000000    0.000000000    0.000000000
end kpoint_path

mp_grid : 12 12 1

begin kpoints
    0.000000000000000    0.000000000000000    0.000000000000000    0.0069444444
    0.000000000000000    0.083333333333333    0.000000000000000    0.0069444444
```

0.000000000000000	0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.000000000000000	0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.000000000000000	0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.000000000000000	0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.000000000000000	-0.500000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.000000000000000	-0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.000000000000000	-0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.000000000000000	-0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.000000000000000	-0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.000000000000000	-0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	0.000000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	-0.500000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	-0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	-0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	-0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	-0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.083333333333333	-0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	0.000000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	-0.500000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	-0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	-0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	-0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	-0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.166666666666667	-0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	0.000000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	-0.500000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	-0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	-0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	-0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	-0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.250000000000000	-0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	0.000000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	0.333333333333334	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	-0.500000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	-0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	-0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	-0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	-0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.333333333333333	-0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.416666666666667	0.000000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.416666666666667	0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.416666666666667	0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.416666666666667	0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.416666666666667	0.333333333333334	0.000000000000000	0.0069444444
0.416666666666667	0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.416666666666667	-0.500000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.416666666666667	-0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444

0.416666666666667	-0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.416666666666667	-0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.416666666666667	-0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.416666666666667	-0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.500000000000000	-0.000000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.500000000000000	0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.500000000000000	0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.500000000000000	0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.500000000000000	0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.500000000000000	0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.500000000000000	-0.500000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.500000000000000	-0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.500000000000000	-0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
0.500000000000000	-0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
0.500000000000000	-0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
0.500000000000000	-0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	-0.000000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	0.500000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	-0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	-0.333333333333334	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	-0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	-0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.416666666666667	-0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	-0.000000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	0.500000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	-0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	-0.333333333333334	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	-0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	-0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.333333333333333	-0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	-0.000000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	0.500000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	-0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	-0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	-0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	-0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.250000000000000	-0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	0.000000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	0.500000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	-0.416666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	-0.333333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	-0.250000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	-0.166666666666667	0.000000000000000	0.0069444444
-0.166666666666667	-0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444
-0.083333333333333	-0.000000000000000	0.000000000000000	0.0069444444
-0.083333333333333	0.083333333333333	0.000000000000000	0.0069444444

```
   -0.083333333333333    0.166666666666667    0.000000000000000    0.0069444444
   -0.083333333333333    0.250000000000000    0.000000000000000    0.0069444444
   -0.083333333333333    0.333333333333333    0.000000000000000    0.0069444444
   -0.083333333333333    0.416666666666667    0.000000000000000    0.0069444444
   -0.083333333333333    0.500000000000000    0.000000000000000    0.0069444444
   -0.083333333333333   -0.416666666666667    0.000000000000000    0.0069444444
   -0.083333333333333   -0.333333333333333    0.000000000000000    0.0069444444
   -0.083333333333333   -0.250000000000000    0.000000000000000    0.0069444444
   -0.083333333333333   -0.166666666666667    0.000000000000000    0.0069444444
   -0.083333333333333   -0.083333333333333    0.000000000000000    0.0069444444
end kpoints
```