

外电场作用下MoS₂的分子结构和电子光谱

杜建宾 冯志芳 张倩 韩丽君 唐延林 李奇峰

Molecular structure and electronic spectrum of MoS₂ under external electric field

Du Jian-Bin Feng Zhi-Fang Zhang Qian Han Li-Jun Tang Yan-Lin Li Qi-Feng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 173101 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20190781

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190781>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

外场作用下C₁₂H₄Cl₄O₂的分子结构和电子光谱研究

Molecular structure and electronic spectrum of C₁₂H₄Cl₄O₂ under external electric field

物理学报. 2018, 67(22): 223101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181454>

基于密度泛函理论的外电场下盐交联聚乙烯分子的结构及其特性

Molecular structure and properties of salt cross-linked polyethylene under external electric field based on density functional theory

物理学报. 2018, 67(18): 183101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180808>

外场作用下邻苯二甲酸二丁酯的分子结构和光谱研究

Molecular structure and spectrum of dibutyl phthalate in an external electric field

物理学报. 2015, 64(7): 073101 <https://doi.org/10.7498/aps.64.073101>

外电场下二氧化硫的分子结构及其特性

Molecular structure and properties of sulfur dioxide under the external electric field

物理学报. 2016, 65(5): 053101 <https://doi.org/10.7498/aps.65.053101>

MoS₂电子屏蔽长度和等离子激元

Electron screening lengths and plasma spectrum in single layer MoS₂

物理学报. 2017, 66(24): 247701 <https://doi.org/10.7498/aps.66.247701>

非共振圆偏振光作用下单层二硫化钼电子结构及其自旋/谷输运性质

Electronic structure and spin/valley transport properties of monolayer MoS₂ under the irradiation of the off-resonant circularly polarized light

物理学报. 2018, 67(10): 107101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180213>

外电场作用下 MoS₂ 的分子结构和电子光谱*杜建宾¹⁾²⁾ 冯志芳²⁾ 张倩²⁾ 韩丽君²⁾ 唐延林³⁾ 李奇峰^{1)†}

1) (天津大学精密仪器与光电子工程学院, 天津 300072)

2) (廊坊师范学院理学院, 廊坊 065000)

3) (贵州大学物理学院, 贵阳 550025)

(2019年5月21日收到; 2019年7月18日收到修改稿)

各种新型材料改善了人类的生产和生活, 二维纳米材料更以其独特的物理化学性质成为了研究的热点. 二硫化钼 (MoS₂) 作为过渡金属硫化物的代表, 具有优异的机械性能和化学稳定性, 为研究其外场效应, 本文采用密度泛函理论方法优化了 MoS₂ 分子在 0—0.1 a.u. (0—5.1423 × 10¹⁰ V/m) 的静电场中基态几何结构, 得到了分子密立根电荷分布、偶极矩和总能量; 在此基础上, 采用含时密度泛函方法研究了 MoS₂ 分子紫外-可见 (UV-Vis) 吸收光谱在此静电场中的变化. 结果显示: 分子内电荷分布随着外电场的增强发生了整体转移; 伴随着电荷的整体转移, 电偶极矩随之增大, 而分子总能量随之减小; 分子最强 UV-Vis 吸收峰的波长为 483 nm, 摩尔吸收系数为 461 L·mol⁻¹·cm⁻¹; 伴随着外电场的逐渐增强, 分子激发态的摩尔吸收系数明显增大, UV-Vis 光谱吸收峰显著红移, 外电场为 0.08 a.u. 时, 其吸收峰基本覆盖了整个可见光波长范围.

关键词: 二硫化钼, 外电场, 密度泛函理论, 紫外-可见光谱

PACS: 31.15.es, 31.15.ee, 33.20.Lg, 33.20.Xx

DOI: 10.7498/aps.68.20190781

1 引言

近年来, 新型二维纳米材料以其独特的物理化学性质而成为研究的热点. MoS₂ 作为典型过渡金属硫化物^[1], 有着与石墨烯类似的二维层状结构, 是一种天然的半导体材料, 具有良好的物理化学稳定性, 因此被广泛用于场效应晶体管^[2]、光电探测器^[3]、电化学储锂^[4]和固体润滑剂^[5]等领域. 另外, 由于 MoS₂ 具有特殊的二维纳米结构, 它也成为海水脱盐^[6,7]、重金属离子液相分离^[8,9]和气体小分子过滤^[10,11]等的优良材料, 因此在水净化和环保等领域也有着广泛的应用前景.

把分子置于强外电场中, 会出现一些新的物理化学现象, 例如化学键碎裂、新激发态产生、新自

由基出现^[12,13]以及分子振动斯塔克效应等^[12,14–18]. 李世雄等^[19]研究了 ZnSe 分子的外场效应, 结果显示外场对分子结构有明显的影响; 谢安东等^[18,20]对自辐射场下 UO₃ 分子的光谱进行了讨论, 证明自辐射场对分子能级有强烈影响; 王藩侯等^[13]发现了 SnSe 的能级和光谱等对外电场有强依赖性; Liu 等^[21]对 5 种不同形式的双层 MoS₂ 的带隙受外加电场的影响进行了仿真研究. 目前, MoS₂ 分子结构和光谱的外场效应研究还未见报道. 本文采用密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的 B3LYP 泛函^[22–25], 在 Def2-TZVP^[26,27] 基组水平上对 MoS₂ 分子的基态几何结构进行了优化, 然后在同样基组水平上采用含时密度泛函 (time-dependent density functional theory, TD-DFT)^[19] 方法对 MoS₂ 分子的紫外-可见 (UV-Vis) 光谱在外

* 国家重点研发计划 (批准号: 2014YQ060773、2017YFC0803600) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: qfli@tju.edu.cn

电场中的变化进行了研究.

2 理论和计算方法

当分子置于外电场中时,体系的哈密顿量 $H^{[28]}$ 为

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

其中, H_0 为无电场时体系的哈密顿量, H_{int} 是外电场 F 对分子体系产生微扰的哈密顿量. H_{int} 在偶极近似时表示为

$$H_{\text{int}} = -\mu \cdot F, \quad (2)$$

其中 μ 为分子体系的电偶极矩.

忽略极化率在强场中的非线性效应,由 Grozema 等提出的模型^[29] 可得

$$E_{\text{exc}}(F) = E_{\text{exc}}(0) - \Delta\mu \cdot F - \frac{1}{2}\Delta\alpha F^2, \quad (3)$$

其中 $\Delta\alpha$ 为极化率的变化量, $\Delta\mu$ 为电偶极矩变化量; E_{exc} , $E_{\text{exc}}(0)$ 分别为有无电场时的激发能. 振子强度 f_{1u} 为^[28,30]

$$g_l f_{1u} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h} S = 3.03966 \times 10^{-6} \sigma S, \quad (4)$$

其中, g_l 等于 1, 为加权因子; σ 表示能量, 单位为 cm^{-1} ; 线强度 S 为原子单位 ($e^2 a_0^2$). 本文是在 Grimme 的半经验方法基础上, 把微扰项 H_{int} 加入到体系的哈密顿量 H_0 中^[20], 并采用 TD-DFT^[19] 来精确计算激发能.

图 1 为 MoS_2 分子的结构, 本文是在 x 轴方向上添加上一系列 0—0.1 a.u. ($0-5.1423 \times 10^{10} \text{ V/m}$) 的外电场, 也就是把微扰项 H_{int} 添加到 Gaussian 程序的哈密顿量中, 然后采用 B3LYP/Def2-TZVP 方法, 优化了 MoS_2 分子基态几何结构, 得到了分子密立根电荷分布、总能量和偶极矩, 最后采用 TD-DFT 方法研究了分子前 10 个激发态的波长和摩尔吸收系数在外电场中的变化. 全部计算由 Gaussian09 软件包完成.

3 不同外电场下 MoS_2 的分子结构

优化无外电场作用时 MoS_2 分子基态几何结构, 得其电子态为 3B_1 , 分子点群为 C_{2v} , Mo—S 键长为 0.212 nm, S—Mo—S 的键角为 114° , 红外最强吸收峰出现在 546.5 cm^{-1} , 由 Mo—S 键的伸缩振动产生, 这与实验值 535.7 cm^{-1} 非常接近^[24], 也

与其他的计算结果相一致^[24,26,31,32], 这说明本文的理论模型和方法是可靠的.

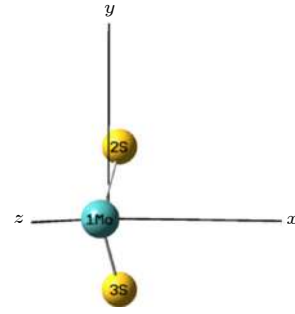


图 1 MoS_2 的分子结构

Fig. 1. Structure of the MoS_2 molecule.

优化不同外电场作用下 MoS_2 分子的基态几何结构, 得到密立根电荷如表 1 所列. MoS_2 中 S 的电负性较强, 无外电场时, Mo 的电荷为 0.782 a.u., S 的电荷为 -0.391 a.u., Mo 和 S 之间的电子云偏向 S, 如图 2 所示; 但随着外电场的增强, 电荷受到的外电场作用越明显, 因此电荷进行了重新分配, 即电子发生了整体转移: Mo 和 S 之间的电子云从无外电场时偏向 S 逐渐向 Mo 偏移, 伴随原子间着电子云的偏移, 各原子带电量也随之改变, 当外电场增大到 0.1 a.u. 时, Mo 和 S 的电性也发生了改变, Mo 带电荷为 -0.069 a.u., S 带电荷为 0.034 a.u.. 从图 2 中可以清晰地看到从无外电场时, 分子的电子云明显偏向 S 原子; 外电场增大到 0.1 a.u., 电子云则主要分布在 Mo 原子周围, 整个过程中 MoS_2 带电总量始终为 0.

表 1 不同电场下原子 Mo 和 S 的电荷 $Q/\text{a.u.}$

Table 1. The charges of Mo and S (unit: a.u.) of the MoS_2 molecule under different external electric fields.

F	0	0.02	0.04	0.06	0.08	0.10
1Mo	0.782	0.752	0.659	0.488	0.237	-0.069
2S	-0.391	-0.376	-0.329	-0.244	-0.119	0.034
3S	-0.391	-0.376	-0.329	-0.244	-0.119	0.034

MoS_2 的电偶极矩随着外电场的增强而增大, 如图 3 所示, 这是由于外电场诱导出分子的感生偶极矩^[15], 同时伴随着电子云相对分子骨架的移动和分子骨架的变形, 即分子的极化, 两者的叠加导致了分子偶极矩的变化.

MoS_2 分子的基态总能量与外电场的关系见

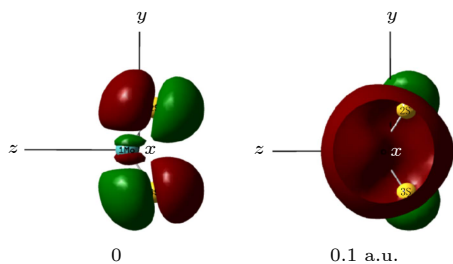

 图 2 MoS₂ 分子占据轨道侧视图

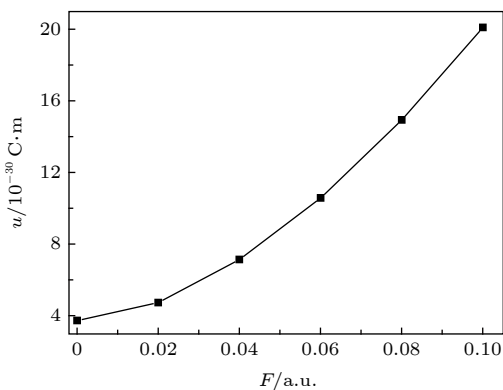
 Fig. 2. The side view of MoS₂ occupied molecular orbital.

 图 3 分子电偶极矩 u 随外电场的变化

 Fig. 3. The relation of dipole moment and electric field intensity of MoS₂.

图 4, $F = 0$ a.u. 时, 基态总能量 $E = -864.7004$ a.u., 但当 F 增大到 0.10 a.u. 时, 基态总能量 E 减小为 -865.0555 a.u., 且减小的趋势加剧. 这是由于内外电场的叠加使得分子几何结构发生了变化: 无外电场时, 分子结构松弛, 分子总能量较大; 但伴随着外电场的增强, 分子结构变得更加紧致、稳固, 分子总能量也随之降低, 计算结果与 (1), (2) 式也是相符的.

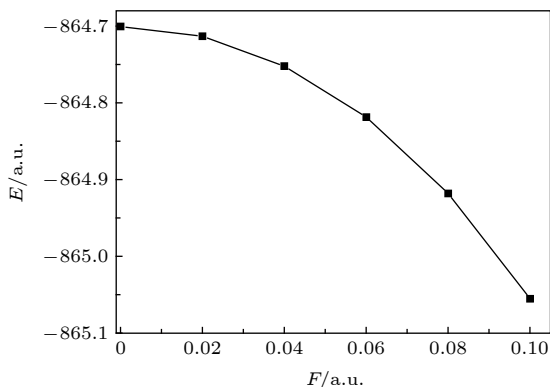

 图 4 外电场下分子总能量 E 的变化

 Fig. 4. The relationship between total energy of MoS₂ molecule and electric field intensity.

4 不同电场下 MoS₂ 分子的紫外-可见吸收光谱

4.1 无外场时 MoS₂ 的激发态波长

在优化分子基态几何结构的基础上, 采用 TD-DFT 计算了 MoS₂ 分子的前 10 个激发态, 得到了分子 UV-Vis 光谱, 如图 5 所示. Jelena Pešić 等^[33] 利用 Perkin-Elmer Lambda 4B UV-Vis 光谱仪, 测量了以 N-Methyl-2-pyrrolidone 为溶剂的 MoS₂ 在 350—750 nm 波长范围的紫外-可见光谱, 结果显示最强吸收出现在 451 nm 处. 对比文献中的实验数据, 我们的计算与之符合较好, 这也说明了我们的方法是可信的, 并且我们的工作也是对文献很好的补充.

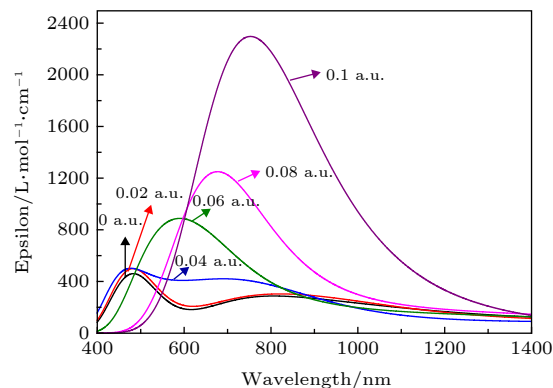

 图 5 不同外电场下的 MoS₂ 分子 UV-Vis 吸收光谱 (Epsilon: 摩尔吸收系数)

 Fig. 5. UV-Vis absorption spectra of MoS₂ molecule under different external electric fields (Epsilon: molar absorption coefficient).

4.2 外电场对激发态波长和摩尔吸收系数的影响

在优化的 MoS₂ 分子基态几何结构的基础上, 采用 TD-DFT 方法计算了 0—0.10 a.u. 的外电场对分子前 10 个激发态的 UV-Vis 光谱产生的影响, 如图 5 所示. 可以看出, 当外电场较弱时, 谱峰的波长变化并不明显, 但随着外电场的增强, 吸收峰显著红移, 当外电场增大到 0.1 a.u. 时, 最强吸收峰波长红移到 753 nm, 相比无电场时的吸收峰向长波方向移动了 270 nm, 红移非常明显, 这是由于当外电场较弱时, 分子中的电子云主要集中在 Mo 和 S 的周围, 如图 6 占据轨道所示; 但随着外

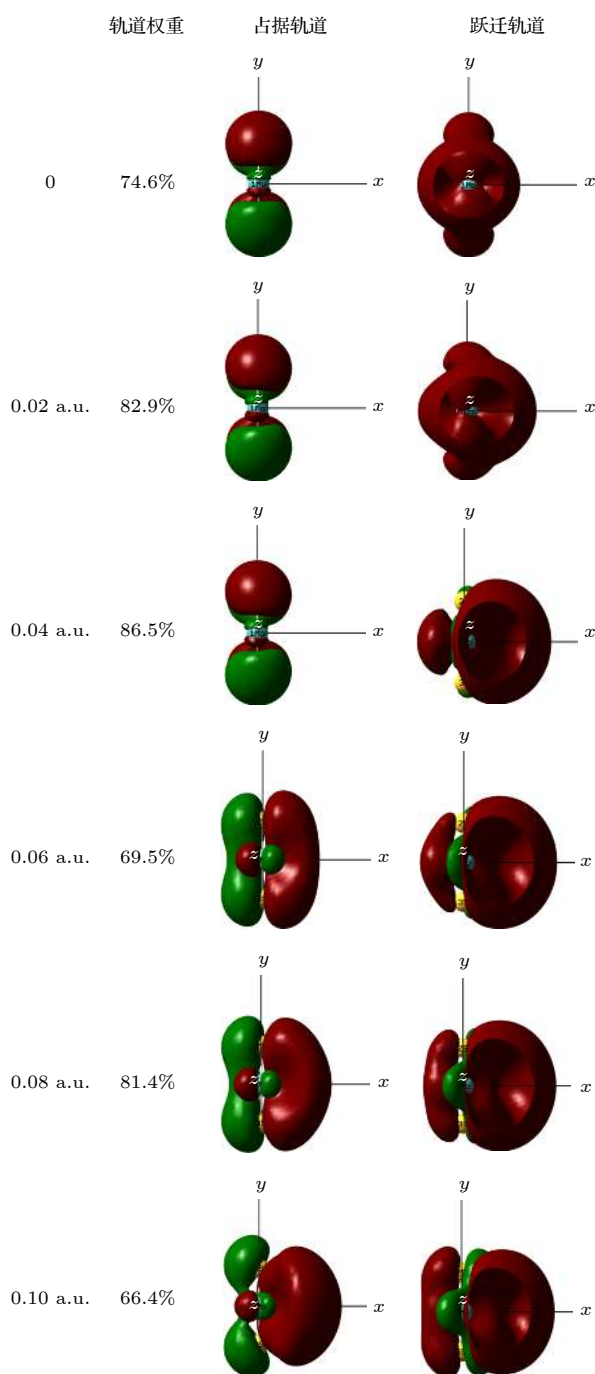


图 6 不同外电场下 MoS_2 激发态的分子轨道 (占据轨道, 填充了电子的分子轨道; 跃迁轨道, 分子被激发时, 电子从占据轨道跃迁到的空轨道; 轨道权重, 分子某一激发态, 构成轨道的各个组成部分的贡献, 图中给出的是所占比例最大的部分)

Fig. 6. Excited state orbital diagram of MoS_2 molecule under different external electric fields (occupied orbitals, molecular orbitals filled with electrons; a transition orbital is a vacant orbital that an electron jumps from an occupied orbital to when a molecule is excited; orbital weight, the contribution of each component of an excited state of a molecule to the composition of the orbital, shown in the figure is the one with the largest proportion).

电场的增强, Mo 和 S 周围的电子云沿电场方向发生了整体转移, 这使得 Mo 和 S 之间的电子云密度变小, Mo 和 S 之间的相互作用随之变弱, 外层电子更易跃迁到高能级, 也就是跃迁时所需的能量减小, 吸收峰波长变长, 即吸收峰红移. 当外电场增大到 0.1 a.u., 分子占据轨道的电子云整体转移非常显著, 因此, 此时的红移也就相当明显了.

随着外电场的增强和吸收峰的红移, 摩尔吸收系数开始增大, 尤其是当外电场增强到 0.1 a.u. 时, 摩尔吸收系数已经增大到无外电场时的将近 5 倍, 如图 5 所示. 这是由于外电场对分子内电子的整体转移, 使得 Mo 和 S 之间的电子云密度变小 (如图 6 占据轨道所示), Mo 和 S 之间的相互作用随之变弱, 外层电子更容易被激发到到高能级, 这也使得跃迁的电子个数增多; 另一方面, 从图 6 的跃迁轨道变化也可以看出, 随着外电场的增强, MoS_2 分子跃迁轨道的电子云密度逐渐增加, 也就是跃迁的电子数增多. 本文从占据轨道和跃迁轨道两个角度都证明了外电场的增强导致了跃迁的电子个数增多, 因此摩尔吸收系数也随之增大了.

MoS_2 分子在外电场中, 吸收峰红移、展宽增加, 摩尔系数增大, 尤其外电场为 0.08 a.u. 时, 其吸收峰基本覆盖了整个可见光波长范围, 这些都可以提高 MoS_2 对可见光的量子吸收效率, 使其更好地利用太阳能.

5 结 论

1) 本文采用 DFT 方法, 优化了不同外电场下 MoS_2 分子的基态几何结构. 结果显示, 随外电场的增强, 分子内电荷发生整体转移, 电偶极矩增大, 而分子总能量减小.

2) 采用 TD-DFT 方法, 研究了 MoS_2 分子 UV-Vis 光谱在不同电场下的变化. 结果显示: 无外场时, 光谱最强吸收峰的波长为 483 nm、摩尔吸收系数为 $461 \text{ L}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$; 随着外电场的增强, 激发能显著降低, 吸收峰红移明显, 摩尔吸收系数剧烈增大.

综上分析可见, 在外电场中, MoS_2 的分子结构变化剧烈. 这些工作对 MoS_2 光电性能利用和改善提供了一定的理论依据, 也对其他光电材料的应用研究有启示作用.

参考文献

- [1] Ayari A, Cobas E, Ogundadegbe O, Fuhrer M S 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 014507
- [2] Radisavljevic B, Radenovic A, Brivio J, Giacometti V, Kis A 2011 *Nat. Nanotechnol.* **6** 147
- [3] Chen M Q 2017 *M. S. Thesis* (Taiyuan: Taiyuan University of Technology) (in Chinese) [陈敏强 2017 硕士学位论文 (太原: 太原理工大学)]
- [4] Dominko R, Arcon D, Mrzel A, Zorko A, Cevc P, Venturini P, Gaberscek M, Remskar M, Mihailovic D 2002 *Adv. Mater.* **14** 1531
- [5] Sun H T 2018 *M. S. Thesis* (Hefei: Anhui University) (in Chinese) [孙华婷 2018 硕士学位论文 (合肥: 安徽大学)]
- [6] Mohammad H, Amir B F, Narayana R A 2015 *Nat. Comms.* **6** 8616
- [7] Li W F, Yang Y M, Weber J K, Zhang G, Zhou R H 2016 *ACS Nano* **10** 1829
- [8] Jafar A, Alireza K 2017 *Comput. Mater. Sci.* **137** 201
- [9] Mateus H K, Jose R B, Marcia C B 2018 *J. Chem. Phys.* **148** 222804
- [10] Wang P, Li W, Du C C, Zheng X, Sun X L, Yan Y G, Zhang J 2017 *Comput. Mater. Sci.* **140** 284
- [11] Zhang Y D, Meng Z S, Shi Q, Gao H Q, Liu Y Z, Wang Y H, Rao D W, Deng K M, Lu R F 2017 *J. Phys.: Condens. Matter* **29** 375201
- [12] Ellert C, Corkum P B 1999 *Phys. Rev. A* **59** R3170
- [13] Wang F H, Huang D H, Yang J S 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 073102 (in Chinese) [王藩侯, 黄多辉, 杨俊升 2013 物理学报 **62** 073102]
- [14] Ledingham K W D, Singhal R P, Smith D J, McCanny T, Graham P, Kilic H S, Peng W X, Wang S L, Langley A J, Taday P F, Kosmidis C 1998 *J. Phys. Chem. A* **102** 3002
- [15] Rai D, Joshi H, Kulkarni A D, Gejji S P, Pathak R K 2007 *J. Phys. Chem. A* **111** 9111
- [16] Iwamae A, Hishikawa A, Yamanouchi K 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 223
- [17] Ellert C, Stapelfeldt H, Constant E 1998 *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **356** 329
- [18] Du J B, Feng Z F, Han L J, Tang Y L, Wu D Q 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 223101 (in Chinese) [杜建宾, 冯志芳, 韩丽君, 唐延林, 武德起 2018 物理学报 **67** 223101]
- [19] Li S X, Wu Y G, Linghu R F, Sun G Y, Zhang Z P, Qin S J 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 043101 (in Chinese) [李世雄, 吴永刚, 令狐荣锋, 孙光宇, 张正平, 秦水介 2015 物理学报 **64** 043101]
- [20] Xie A D, Xie J, Zhou L L, Wu D L, Ruan W, Luo W L 2016 *Chin. J. Atom. Mol. Phys.* **33** 989 (in Chinese) [谢安东, 谢晶, 周玲玲, 伍冬兰, 阮文, 罗文浪 2016 原子与分子物理学报 **33** 989]
- [21] Liu Q H, Li L Z, Li Y F, Gao Z X, Chen Z F, Lu J 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 21556
- [22] Gemming S, Seifert G, Götz M, Fischer T, Ganteför G 2010 *Phys. Status Solidi B* **247** 1069
- [23] Peverati R, Truhlar D G 2012 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** 13171
- [24] Liang B Y, Andrews L 2002 *J. Phys. Chem. A* **106** 6945
- [25] Mayhall N J, Becher E L, Chowdhury A, Raghavachari K 2011 *J. Phys. Chem. A* **115** 2291
- [26] Wang B, Wu N, Zhang X B, Huang X, Zhang Y F, Chen W K, Ding K N 2013 *J. Phys. Chem. A* **117** 5632
- [27] Wang Y Y, Deng J J, Wang X, Che J T, Ding X L 2018 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** 6365
- [28] Wu D L, Tan B, Wan H J, Zang X Q, Xie A D 2013 *Chin. Phys. B* **22** 123101
- [29] Grozema F C, Telesca R, Joukman H T, Snijders J G 2001 *J. Chem. Phys.* **115** 10014
- [30] Zhu Z H, Fu Y B, Gao T, Chen Y L, Chen X J 2003 *Chin. J. Atom. Mol. Phys.* **20** 169 (in Chinese) [朱正和, 付依备, 高涛, 陈银亮, 陈晓军 2003 原子与分子物理学报 **20** 169]
- [31] Gemming S, Tamuliene J, Seifert G, Bertram N, Kim Y D, Ganteför G, 2006 *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process.* **82** 161
- [32] Murugan P, Kumar V, Kawazoe Y, Ota N 2005 *Phys. Rev. A: At. Mol. Opt. Phys.* **71** 063203
- [33] Jelena P, Jasna V, Tijana T I, Marko S, Radoš G 2018 *Opt. Quant. Electron.* **50** 291

Molecular structure and electronic spectrum of MoS₂ under external electric field*

Du Jian-Bin¹⁾²⁾ Feng Zhi-Fang²⁾ Zhang Qian²⁾
Han Li-Jun²⁾ Tang Yan-Lin³⁾ Li Qi-Feng^{1)†}

1) (*School of Precision Instrument and Optoelectronics Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China*)

2) (*College of Science, Langfang Normal University, Langfang 065000, China*)

3) (*College of Physics, Guizhou University, Guiyang 550025, China*)

(Received 21 May 2019; revised manuscript received 18 July 2019)

Abstract

A variety of new materials have improved the production and life of human beings. Two-dimensional nano materials have become a research hotspot due to their unique physical and chemical properties. Molybdenum disulfide (MoS₂) is representative of transition metal sulfide, with excellent mechanical properties and chemical stability. In order to study the influence of external electrical field on the molecular structure and spectrum, here in this work, the density functional theory with the hybrid B3LYP at Def2-TZVP level is employed to calculate the geometrical parameters of the ground state of MoS₂ molecule under external electric fields ranging from 0 to 0.1 a.u. ($0-5.1423 \times 10^{10}$ V/m). Based on the optimized structures, the time-dependent density functional theory at the same level as the above is adopted to calculate the absorption wavelengths and the molar absorption coefficients for the first ten excited states of MoS₂ molecule under external electric fields. The results show that the most strongest absorption band is located at 483 nm with a molar absorption coefficient of 461 L·mol⁻¹·cm⁻¹ in the UV-Vis absorption spectrum. The intramolecular charge transfers as a whole with the enhancement of the external electric field. The electric dipole moment increases with the external electric field rising, while the total molecular energy decreases with external electric field increasing. With the enhancement of the external electric field, the absorption peaks show a significant redshift. When the electric field increases to 0.1 a.u., the redshift is obvious. This can be explained as follows. When the external electric field is weaker, the electron transfer in the molecule is not significant. However, with the augment of the external electric field, the electron transfer in the molecule occurs as a whole. This makes the electron interaction between Mo and S weaker, thus the electron transition is more likely to occur. The energy required for excitation is reduced, and the wavelength of the excited state becomes longer, that is, the absorption peak takes a redshift. With the enhancement of the external electric field, the molar absorption coefficient increases obviously. This is because the overall transfer of the external electric field to the electron makes the electron cloud density of the MoS₂ molecule increase and the number of electrons in transition augment. This work provides a theoretical basis for the utilization and improvement of MoS₂ photoelectric properties, and also enlightens the application research of other photoelectric materials.

Keywords: MoS₂, external electric field, density functional theory, ultraviolet-visible spectrum

PACS: 31.15.es, 31.15.ee, 33.20.Lg, 33.20.Xx

DOI: 10.7498/aps.68.20190781

* Project supported by the National Key Research and Development Program of China (Grant Nos. 2014YQ060773, 2017YFC0803600).

† Corresponding author. E-mail: qfli@tju.edu.cn