

电磁场调制下的应变黑磷烯带间光电导*

柏文庆¹⁾²⁾³⁾ 杨江涛¹⁾²⁾³⁾ 杨翠红^{1)2)3)†} 陈云云¹⁾²⁾³⁾

1) (南京信息工程大学物理与光电工程学院, 南京 210044)

2) (南京信息工程大学, 江苏省大气海洋光电探测重点实验室, 南京 210044)

3) (南京信息工程大学, 江苏省气象光子学与光电探测国际合作联合实验室, 南京 210044)

(2024年3月29日收到; 2024年5月8日收到修改稿)

黑磷烯具有各向异性且独特的光电性能被广泛研究. 应变、电压等常用来调制能带结构, 进而调制其光电特性. 本文采用紧束缚近似哈密顿量, 考虑施加垂直磁场、电场、面内面外应变条件下的黑磷烯能带结构, 进一步利用 Kubo 公式研究了黑磷烯光电导率在多个调制因子下的特征, 并从能带结构进行了机理分析. 垂直磁场使能带劈裂, 产生多通道带间跃迁, 光电导率表现出多个峰. 随着面内拉伸应变增加能隙增加, 光电导峰位依赖于能隙. 而面外拉伸应变对能隙的调制区别于面内应变, 能隙表现出非单调变化. 电场通过带隙的变化, 调制光电导率峰值位置. 综合不同的调制因子, 能带和光电导表现出丰富的调制效果, 为研究基于黑磷烯光电器件的应用提供理论支持.

关键词: 黑磷烯, 能带调控, 各向异性, 光电导**PACS:** 78.67.-n, 78.67.Wj, 78.20.-e, 78.56.-a**DOI:** 10.7498/aps.73.20240445

1 引言

二维材料是指具有原子级厚度的平面材料, 其电子仅可在两个维度的纳米尺度 (1—100 nm) 进行运动, 具有新颖的物理、化学性质. 自从石墨烯成功在实验室中制备出来后^[1], 二维材料已成为材料科学与技术中一个备受关注的领域. 一方面, 石墨烯由于其带隙为零, 具有很高载流子迁移率, 对光的吸收范围没有选择性, 很容易光饱和. 另一方面, 零带隙的性质也为石墨烯的光电器件设计带来了一些限制. 过渡金属硫化物 (transition metal dichalcogenides, TMDs)^[2] 二维纳米材料是继石墨烯后又一类重要的二维半导体纳米材料, 虽然二硫族化合物电荷载流子迁移率低于石墨烯, 但其较宽的带隙以及较好的开关电流比使其在开发新型光

电功能器件方面具有独特优势. 黑磷烯 (black phosphene, BP) 是近年来被广泛研究的一种二维层状半导体材料, 其不仅有着介于石墨烯和过渡金属硫化物之间的带隙^[3], 还有远超过渡金属二硫化物的高载流子迁移率 (约为 $1000 \text{ cm}^2/\text{V}$)^[3]、高开关比 (最高可达 10^5)^[4,5] 等特性, 这使得其在光电、热电^[6] 以及场效应晶体管等领域有着广泛的应用前景.

本征状态下的二维材料在应用中往往无法达到所需要的带隙范围, 为了更好地实现二维材料的应用, 研究人员提出了许多方案来对其带隙以及光电性能进行调控. 其中主要包括层数堆叠、掺杂、机械应变、外加电场以及外加磁场等方法. Qiao 等^[7] 通过密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 计算了 1—5 层黑磷的带隙, 从理论上证明了直接带隙、高载流子迁移率和高输运各向异性均可通

* 国家自然科学基金 (批准号: 11547030) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: chyang@nuist.edu.cn

过层厚来调节. Ezawa^[8] 基于紧束缚近似模型分析了黑磷烯的能带结构, 得到黑磷烯的带隙值为 1.52 eV. Tran 等^[9] 通过第一性原理 GW-Bethe-Salpeter 方程模拟不同层数黑磷的能带结构. 研究者考虑了自能校正和电子-空穴激子结合能, 计算得到单层的黑磷带隙值约为 2.0 eV. 随着层数的增加, 带隙值呈幂函数规律递减, 块状黑磷的带隙值约为 0.3 eV. Li 等^[10] 直接利用光致发光技术测量单层到块状黑磷的带隙为 1.73—0.35 eV. 原子掺杂是一个广泛用于改变材料性质的方法. Kim 等^[11] 使用原位表面掺杂技术在少层黑磷中进行钾掺杂实现了广泛可调的带隙. 应变可以使二维材料的晶格发生畸变, 影响能带结构, 从而调控材料的带隙大小. 黑磷烯的面内褶皱蜂窝结构, 使其具有相当的柔韧性, Peng 等^[12] 通过第一性原理计算得出黑磷烯最高可承受 30% 的应变, 其卓越的机械柔韧性打开了柔性器件应用的大门. Rodin 等^[13] 采用 DFT 和紧束缚近似模型研究了面外应变对于黑磷烯电子结构的影响, 随着压缩应变的增大, 黑磷烯由直接带隙半导体 (0% 应变) 变为间接带隙半导体 (6% 应变), 应变增大到 25% 时, 黑磷烯转变为金属相, 当施加压缩应变在 25%—30% 时, 可视为半金属相. Fei 等^[14] 通过施加面内单、双轴应变调控能带, 模拟了应变对黑磷烯各向异性电子迁移率的控制. 施加电场改变了二维材料内部的原子间距和原子间的相互作用, 能带结构被调整, 带隙大小发生变化. Dai 和 Zeng 等^[15] 采用 DFT 方法对垂直方向上施加电场的双层黑磷烯结构进行研究, 结果显示, 在较强的电场下双层黑磷带隙由 0.78 eV 降至 0.56 eV. Chen 等^[16] 通过垂直电场将 5 nm 厚的黑磷光电探测器的响应范围从 3.7 μm 扩展到 7.7 μm , 这表明了黑磷烯具有实现紧凑、可集成中红外光电探测器、调制器和光谱仪材料的潜力.

黑磷的电子结构在磁场中展现出许多新奇的特点, Li 等^[17] 构建了特殊的黑磷场效应晶体管, 通过施加强磁场首次观察到了整数量子霍尔效应, 他们还发现分裂的朗道能级在一定角度的磁场中产生交叉. Pereira 等^[18] 研究了单、双层黑磷的朗道能级谱随磁场强度的变化, 对于双层黑磷, 偏置磁场能够闭合带隙, 这一结果可作为可调门控电子器件的基础. Zhou 等^[19] 在理论上研究了垂直磁场下黑磷薄膜的朗道能级和磁光导电性, 研究发现朗道能级与磁场和能级指数之间呈次线性关系. 外加

磁场引起朗道能级之外, 载流子自旋在磁场下相互作用引起塞曼效应. Phuong 等^[20] 研究了黑磷烯考虑塞曼效应的能级分裂. Keshtan 和 Esmailzadeh^[21] 利用平衡格林函数法并应用 Landauer-Buttiker 公式, 研究了零温度下锯齿方向上黑磷烯纳米带的自旋相关电子传输特性. 其他类似 MnB、碳氮化合物片 (carbon nitride sheets, CNs) 的二维材料, 室温铁磁性也是二维材料应用于自旋电子器件的研究重点^[22-24].

黑磷烯具有面内褶皱的六边形晶体结构, 在沿 x 方向的扶手椅方向 (armchair, AC) 和沿 y 方向的锯齿方向 (zigzag, ZZ) 体现出强烈的面内各向异性, 结构上的各向异性直接导致了黑磷烯在电学和光学等多方面物理性质的各向异性^[6]. Li 和 Appelbaum^[25] 通过群论对远离布里渊中心的 $k\cdot p$ 微扰进行简化处理, 揭示了黑磷烯 sp^3 杂化下载流子有效质量各向异性的起源和不同方向上的光学跃迁规则. Le 等^[26] 运用 Kubo 公式, 计算了紧束缚近似下施加栅极电压的黑磷烯光电导, 并进一步估计了圆偏振光在单层黑磷中的反射率、透射率、吸收率和偏振度, 展示了垂直电场下电磁波通过单层磷烯传播的情况. Qiao 等^[7] 计算了单层到 5 层黑磷烯和块体黑磷材料的光吸收谱, 结果显示从单层黑磷烯增加层数到块体的黑磷过程中, AC 方向和 ZZ 方向的光吸收带边均随层数增加而降低, 沿 AC 方向的下降速率比沿 ZZ 方向更高.

本文在施加垂直磁场、垂直电场、单轴以及三轴应变的条件下, 采用紧束缚近似研究黑磷烯的能带, 利用 Kubo 公式研究和计算黑磷烯光电导. 具体分析不同磁场、电场下的单轴/三轴应变对黑磷烯光电导调制规律及其机制. 本文对光电导的调制结果与结论可以为黑磷烯柔性光电子器件在外场作用下的应用提供理论基础.

2 理论模型

采用紧束缚近似, 考虑电场磁场作用下黑磷烯哈密顿量表示为^[20,27,28]

$$H = \sum_{(i,j)} \sum_s t_{ij} c_{i,s}^\dagger c_{j,s} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{sl} G_{sl} c_{i,sl}^\dagger c_{i,sl} + g\mu_B B \sum_i c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow} + \text{H.c.} \quad (1)$$

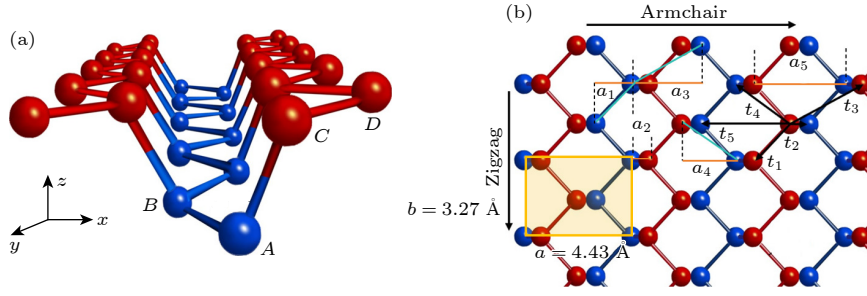


图 1 黑磷烯晶格结构示意图 (a) 三维; (b) 二维

Fig. 1. Schematic diagram of lattice structure of BP: (a) Three-dimensional; (b) two-dimensional.

黑磷烯的晶格结构如图 1 所示, (1) 式考虑了 5 个最邻近格点对同一个原子的作用. t_i 为不同原子之间的跃迁能, 也称作跳变参数. 其中参数 t_1 和 t_2 为最邻近跃迁能, 对能带起到关键作用. $c_{i,s}^\dagger/c_{j,s}$ 是在 i/j 格点处自旋为 s 的电子产生/湮灭算符, 只考虑最邻近原子之间的相互作用 (如图 1 中的 A/B, C/D 原子). G_{sl} 代表施加在原胞层顶部和底部之间的垂直电场. $g\mu_B B$ 代表磁场作用项, g 是朗德因子, μ_B 是玻尔磁子, B 为磁感强度. a, b 对应 x, y 轴方向的晶格常数, 其值分别为 4.42936 \AA , 3.27 \AA , a_i 表示最邻近原子之间的距离在 x 轴方向上的投影值. t_i 及 a_i 的具体数值见表 1^[27,28].

 表 1 黑磷烯的跳变参数与晶格常数^[27,28]

 Table 1. Hopping energy and lattice parameter of BP^[27,28].

t_i	具体数值/eV	a_i	具体数值/Å
t_1	-1.22	a_1	1.41763
t_2	3.665	a_2	0.79732
t_3	-0.205	a_3	3.01227
t_4	-0.105	a_4	2.21468
t_5	-0.055	a_5	3.63258

引入应变因子后, 跳变参数 t_i 将发生改变. 晶格中初始位置坐标 r_i 的原子受到 $\gamma = \{x, y, z\}$ 方向的应变 ε_γ 作用后其位置表示为 $\tilde{r}_i = [1 + \sum_\gamma \alpha_i^\gamma \varepsilon_\gamma] r_i$ ^[29,30], 其中拉伸应变的系数 $\alpha_i^\gamma = (r_{i\gamma}/r_i)^2$, 具体值见表 2^[29,30]. 根据 Harrison 规则 ($t_i \propto r_i^{-2}$) 跃迁能与应变分量的关系为 $\tilde{t}_i \approx [1 - 2 \sum_\gamma \alpha_i^\gamma \varepsilon_\gamma] t_i$ ^[29,30].

 表 2 黑磷烯的应变系数^[29,30]

 Table 2. Strain coefficient of BP^[29,30].

γ	α_1^γ	α_2^γ	α_3^γ	α_4^γ	α_5^γ
x	0.4460	0.0992	0.7505	0.3976	0.7530
y	0.5571	0	0.2461	0.2280	0
z	0	0.9052	0	0.3722	0.2538

通过求解哈密顿量 H , 在考虑了垂直磁场、电场及应变作用下的黑磷烯能带表示为

$$E_\pm^s(\mathbf{k}) = f(\mathbf{k}) \pm \sqrt{V^2/4 + g^*(\mathbf{k})g(\mathbf{k})} \mp sg\mu_B B, \quad (2)$$

式中,

$$f(\mathbf{k}) = \tilde{t}_4 f_4(\mathbf{k}), \quad (3a)$$

$$g(\mathbf{k}) = \tilde{t}_1 f_1(\mathbf{k}) + \tilde{t}_2 f_2(\mathbf{k}) + \tilde{t}_3 f_3(\mathbf{k}) + \tilde{t}_5 f_5(\mathbf{k}). \quad (3b)$$

这里, $f_1(\mathbf{k}) = 2e^{-ik_x a_1} \cos(k_y b/2)$, $f_2(\mathbf{k}) = e^{ik_x a_2}$, $f_3(\mathbf{k}) = 2e^{-ik_x a_3} \cos(k_y b/2)$, $f_4(\mathbf{k}) = 4 \cos(k_x a/2) \times \cos(k_y b/2)$, $f_5(\mathbf{k}) = e^{-ik_x a_5}$. k_x 和 k_y 分别表示 x 和 y 方向的波矢, $s = \pm 1$ 代表自旋向上或自旋向下.

在 Γ 点 ($k_y = 0, k_x = 0$) 的能隙为该点处导带与价带之差:

$$\varepsilon_g = 2\sqrt{V^2/4 + (2\tilde{t}_1 + \tilde{t}_2 + 2\tilde{t}_3 + \tilde{t}_5)^2} - 2g\mu_B B. \quad (4)$$

本征状态下的黑磷烯带隙为 $\varepsilon_g^0 = 2(2t_1 + t_2 + 2t_3 + t_5) = 1.52 \text{ eV}$.

利用 Kubo 公式计算黑磷烯外加光场 $\mathbf{E}(\omega, t)$ 后的黑磷烯带间光电导 (interband optical conductivity, IOC), 此时, 考虑光场和费米子之间相互作用的总哈密顿量变为 $H = H(\mathbf{k}) + H_{\text{int}}$, 作用项 $H_{\text{int}} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{A}$, $\mathbf{J} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{E}$ 是与光电导张量 $\boldsymbol{\sigma}$ 相对应的电流密度, 矢势 $\mathbf{A} = \partial \mathbf{E} / \partial t$, 黑磷烯 AC 和 ZZ 方向的纵向带间光电导表示为^[28]

$$\begin{aligned} \sigma_{u,u}^{\text{inter}}(\omega) &= i \frac{\sigma_0}{\hbar\omega} \sum_{\mathbf{k} \in \text{FBZ}} (\beta_{\mathbf{k}}^u)^2 \left[\left(\frac{f_{\mathbf{k},+}^s - f_{\mathbf{k},-}^{s'}}{\hbar\omega + (E_+^s - E_-^{s'}) + i\delta} \right) \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{f_{\mathbf{k},+}^s - f_{\mathbf{k},-}^{s'}}{\hbar\omega - (E_+^s - E_-^{s'}) + i\delta} \right) \right], \quad (5) \end{aligned}$$

式中 $u = x$ 或 y , $\sigma_0 = e^2/\hbar$, δ 是能级展宽大小, 本文中 $\delta = 0.08 \text{ eV}$, 系数 $\{\alpha_{\mathbf{k}}^u, \beta_{\mathbf{k}}^u\}$ 见附录 A. 由于

结构的对称性, 本征状态下黑磷烯的霍尔电导 $\sigma_{x,y} = \sigma_{y,x} = 0$. (5) 式中的 $\beta_{\mathbf{k}}^x$ 和 $\beta_{\mathbf{k}}^y$ 对应黑磷烯中的费米子速度, 沿两个方向的 $\beta_{\mathbf{k}}^u$ 分布差异决定了黑磷烯的各向异性光电导. k_B 是玻尔兹曼常数, 温度 T 取 10 K. $f_{\mathbf{k},\pm}^s = 1/[\exp(\epsilon_{\mathbf{k},\pm}^s - \mu)/k_B T]$ 是在化学势 μ 处的费米-狄拉克分布函数.

3 计算结果与分析

3.1 磁场、电场及应变作用下的黑磷烯能带结构

首先研究不同磁场、栅极电压和面内 x 轴单轴应变下的黑磷烯能带变化. 本文施加磁场对应的能量范围为 $[0 \text{ eV}, 0.76 \text{ eV}]$, 应变施加范围选为 $[-20\%, +20\%]$, 分别用符号+和-来表示拉伸应变和压缩应变, 垂直电压对应的能量范围为 $[-3 \text{ eV}, +3 \text{ eV}]$, 本征状态下 (未施加任何外场) 的带隙值 ϵ_g^0 为 1.52 eV.

图 2(a) 展示了施加磁场下黑磷烯能带变化情况, 未施加磁场时, 本征黑磷烯自旋简并, 能级

为导带和价带两条, 外加磁场, 能级分裂为 4 条. 当磁场因子 m ($m = g\mu_B B$) 增至 $\epsilon_g^0/2$ 时, 能级为 $\epsilon_{\mathbf{k},+}^{\downarrow}$, $\epsilon_{\mathbf{k},+}^{\uparrow}$, $\epsilon_{\mathbf{k},-}^{\uparrow}$ 和 $\epsilon_{\mathbf{k},-}^{\downarrow}$, 为方便表示, 分别用 $\epsilon_{\mathbf{k},-}^{\downarrow} \rightarrow 1$, $\epsilon_{\mathbf{k},-}^{\uparrow} \rightarrow 2$, $\epsilon_{\mathbf{k},+}^{\uparrow} \rightarrow 3$ 和 $\epsilon_{\mathbf{k},+}^{\downarrow} \rightarrow 4$ 来指代. 由于能带的分裂, 价带与导带之间出现 4 种跃迁, 分别表示为 $1 \rightarrow 4$ (Γ 点处的能隙大小为 $\epsilon_g^0 + 2m$), $1 \rightarrow 3$ (Γ 点处的能隙大小为 ϵ_g^0), $2 \rightarrow 3$ (Γ 点处的能隙大小为 $\epsilon_g^0 - 2m$) 和 $2 \rightarrow 4$ (Γ 点处的能隙大小为 ϵ_g^0). 图 2(b), (c) 分别展示了施加电场和面内应变下黑磷烯能带变化情况, 可以看出施加电场和应变时能带不分裂. 随着电场逐渐增大, 黑磷烯的导带和价带逐渐远离, 带隙变大. 施加面内压缩应变时, 带隙减小; 相反地, 施加面内拉伸应变时, 带隙增大.

图 3 展示了同时施加垂直磁场和单轴应变下的黑磷烯带隙变化. 在磁场大小不变的情况下, 施加沿 x 或 y 轴方向的应变 (图 3(a), (b)), 应变由 -20% 增加到 $+20\%$ 的过程中带隙值单调增大, 当施加拉伸应变 $\epsilon_{x/y} = 20\%$ 时带隙最大. 由 (4) 式可知, 带隙取决于除 \tilde{t}_4 之外的所有跃迁能. 在这些跃

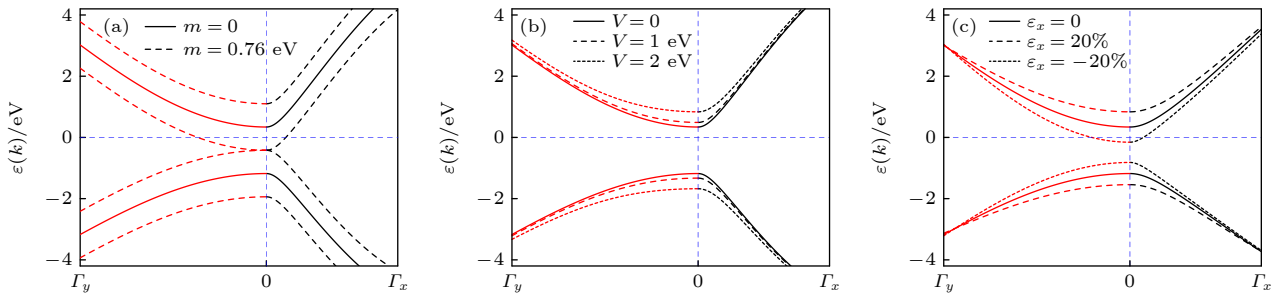


图 2 黑磷烯能带示意图 (a) 磁场下; (b) 电场下; (c) x 轴应变下

Fig. 2. Energy band structure of BP in the presence: (a) Magnetic field; (b) electric field; (c) x -axis strain.

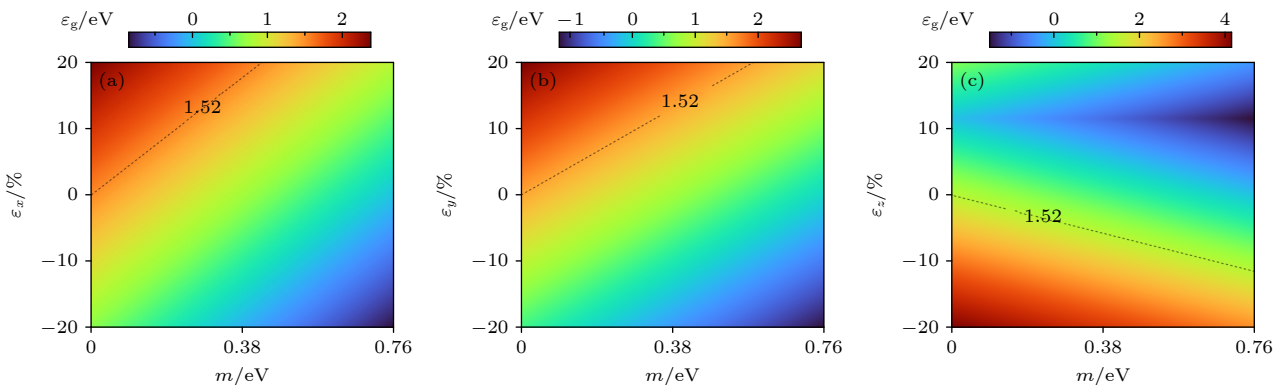


图 3 同时施加磁场和应变下的黑磷烯带隙 (虚线 1.52 对应的是本征带隙的位置) (a) 施加 x 轴应变; (b) 施加 y 轴应变; (c) 施加 z 轴应变

Fig. 3. Bandgap of BP in the presence of the magnetic field and strain applied along (Dashed line corresponds to the position of the intrinsic band gap): (a) x -axis; (b) y -axis; (c) z -axis.

迁中, \tilde{t}_2 和 \tilde{t}_1 分别是幅度最大和第二大的跃迁能, 并且对带隙的影响最重要. 当 x 轴方向拉应变增加时, \tilde{t}_1 增大 (\tilde{t}_1 为负值, 其绝对值减小), \tilde{t}_2 减小, 由于应变系数 α_1^x 较 α_2^x 大得多, 带隙变化由 \tilde{t}_1 主导, 这使得带隙随着单轴 x 拉伸/压缩应变的增大而增加/减小. y 方向施加应变时带隙变化情况与 x 方向类似. 因为 y 方向的应变系数 α_1^y 大于 x 方向的 α_1^x , 且 α_2^y 为 0, 所以施加 y 轴应变时的带隙变化幅度比 x 轴应变大. 施加相同的 x 或 y 轴应变时, 带隙随着磁场的增大逐渐减小. 相较于 x 和 y 轴应变下带隙的单调变化, z 轴应变下的带隙在 $\varepsilon_z = 12\%$ 存在一极小值. z 方向上的应变系数 $\alpha_1^z = 0$, 而 α_2^z 的值较大, 所以施加 z 方向上的应变时, \tilde{t}_1 不变, 主要改变的是 \tilde{t}_2 . 当 z 轴拉伸应变由 0 开始增大时, $2\tilde{t}_1 + \tilde{t}_2$ 的值变小, 拉伸应变增大到 12% 时, 绝对值 $|2\tilde{t}_1 + \tilde{t}_2|$ 约为 0, $2\tilde{t}_1 + \tilde{t}_2 + 2\tilde{t}_3 + \tilde{t}_5$ 近似为 0, 能带开始发生交叠, 此时带隙为零, 继续施加拉伸应变, 绝对值 $|2\tilde{t}_1 + \tilde{t}_2|$ 开始增大, 能带交叠变大, 上下能带发生逆转, 产生负带隙. 对黑磷烯施加相同大小的单轴应变时, 带隙随磁场的增大而减小.

图 4 展示的同时施加垂直电场和单轴应变下的黑磷烯带隙变化. 由 (2) 式可知, 黑磷烯的带隙值是电场 V 的偶函数, 其对称轴为 $V = 0$. 在施加相同单轴应变的情况下, 随着正向/反向偏压的增大, 带隙值单调增大. 施加相同大小电压时, 带隙随面内 x/y 轴应变减小而减小, 随着面外 z 轴应变先减小后增大, 在拉伸应变 $\varepsilon_z = 12\%$ 时能隙达极小值.

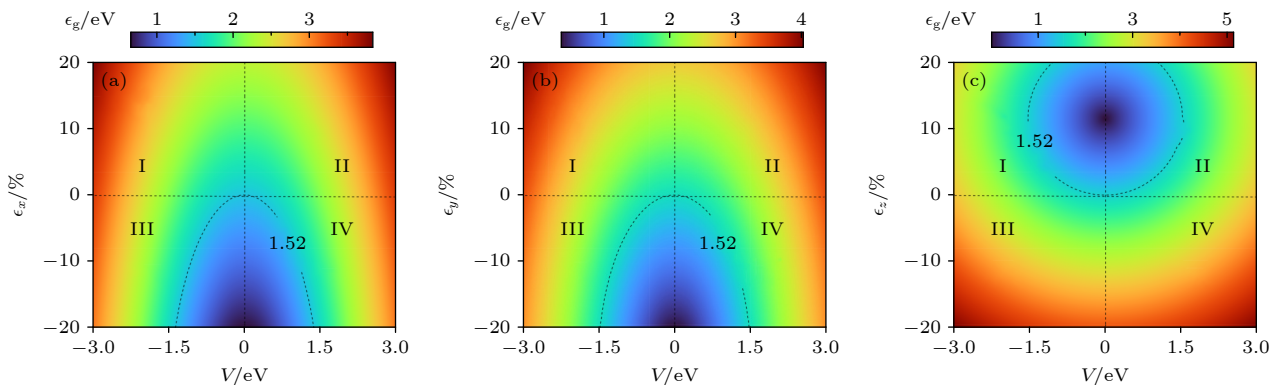


图 4 同时施加电场和应变下的黑磷烯带隙(虚线 1.52 对应的是本征带隙的位置) (a) 施加 x 轴应变; (b) 施加 y 轴应变; (c) 施加 z 轴应变

Fig. 4. Bandgap of BP in the presence of the electric field and strain applied along (Dashed line corresponds to the position of the intrinsic band gap): (a) x -axis; (b) y -axis; (c) z -axis.

3.2 磁场与应变的光电导

能带的调制和载流子状态与光学性质直接相关, 下文具体从磁场下的单轴应变、三轴应变对黑磷光电导调制情况来研究其光学性质. 在研究黑磷稀光电导受应变影响时, x, y 方向的应变施加范围为 $[-20\%, +20\%]$, z 方向的应变施加范围为 $[-10\%, +10\%]$. 黑磷烯光电导的实部对应着能带中的跃迁与光吸收, 实部值越大光吸收越强, 光电导的虚部与光场中能带间的电子散射相关. 当入射光能量大于能隙时, 黑磷烯的总光电导率由带间光学跃迁主导, 当入射光能量低于能隙时, 总光电导率由带内光学跃迁主导. 本文着重考虑带间跃迁对于黑磷烯光电导的影响.

带间光电导率随单轴应变和磁场变化情况如图 5—图 8 所示. 图中红色虚线、黑色实线和蓝色点线曲线分别代表压缩应变、无应变和拉伸应变情况下的黑磷烯光电导率, (a), (b) 展示了未施加磁场的情况, (c), (d) 展示了施加磁场的情况. 光电导起源于载流子的带间跃迁, 黑磷烯的光电导表现出各向异性. 本征状态下 (黑色曲线), AC 方向光电导率峰值边缘的入射光能量约为 1.52 eV, ZZ 方向光电导率峰值边缘的入射光能量约为 7.6 eV. Li 和 Appelbaum^[25] 从电子能带结构对称性出发, 解释了黑磷稀光学跃迁的选择规则和各向异性的起源. 他们的研究表明 sp^3 杂化下黑磷稀 AC 方向的面内动量矩阵元 \hat{p}_{AC} 在布里渊区中心处对于对称波函数形式的双简并第一激发态耦合后不为零, 载流子在此处的跃迁概率较大, 允许直接跃迁, 故光电导率峰值出现在带隙处. ZZ 方向的面内动量矩阵元 \hat{p}_{ZZ} 对双简并第一激发态耦合后为零, 带隙处

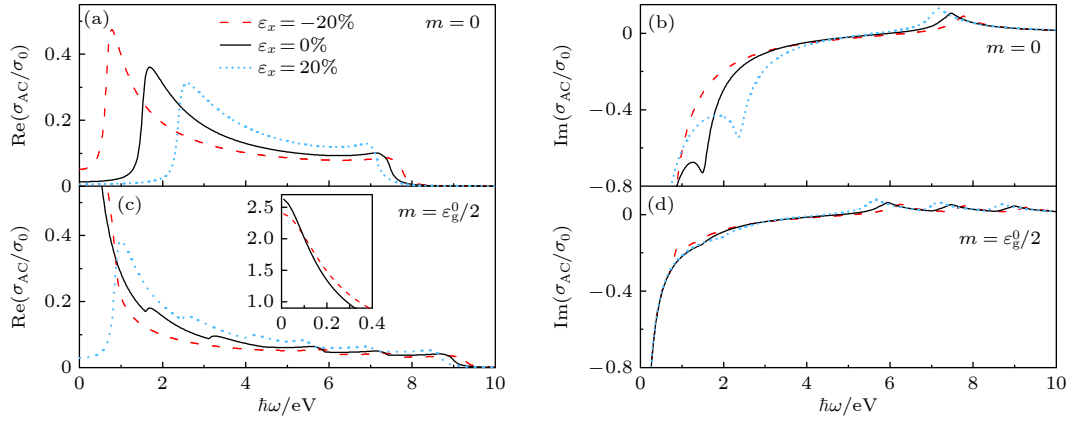


图 5 AC 方向的带间光电导率在不同 x 轴应变条件下随入射光能量的变化 (a), (c) 不同磁场下的光电导实部; (b), (d) 不同磁场下的光电导虚部. 黑色、红色和蓝色曲线分别表示无应变、压缩应变和拉伸应变下的结果

Fig. 5. Interband optical conductivity along the AC direction as a function of the incident photon energy at different x -axial strain: (a), (c) Real part under different magnetic fields; (b), (d) the imaginary part under different magnetic fields. Black, red, and blue curves represent the results with no strain, compressive strain, and tensile strain, respectively.

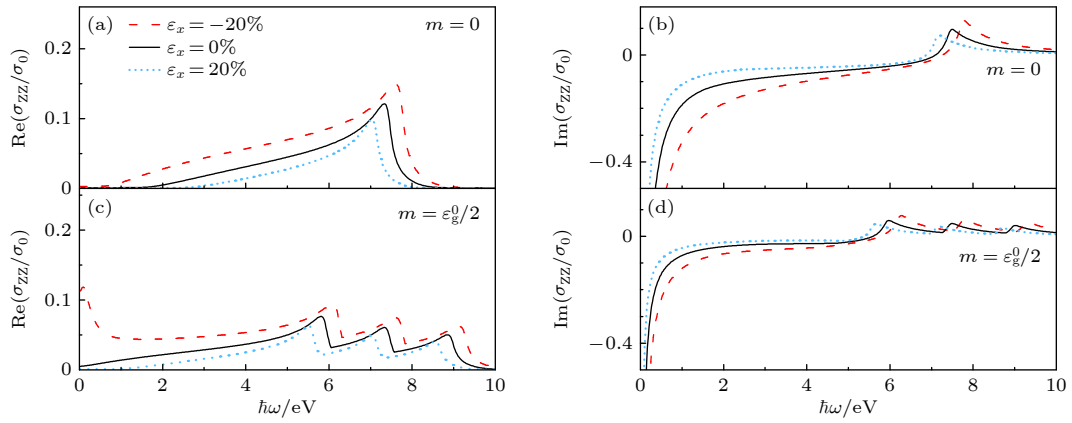


图 6 ZZ 方向的带间光电导率在不同 x 轴应变条件下随入射光能量的变化 (a), (c) 不同磁场下的光电导实部; (b), (d) 不同磁场下的光电导虚部

Fig. 6. Interband optical conductivity along the ZZ direction as a function of the incident photon energy at different x -axial strain: (a), (c) Real part under different magnetic fields; (b), (d) the imaginary part under different magnetic fields.

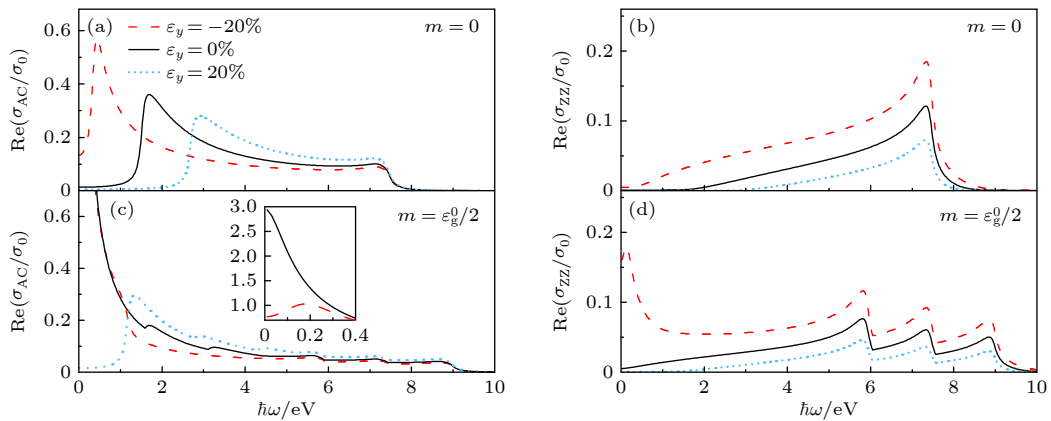


图 7 带间光电导率实部在不同 y 轴应变条件下随入射光能量的变化 (a), (c) 不同磁场下 AC 方向的结果; (b), (d) 不同磁场下 ZZ 方向的结果

Fig. 7. Real part of the interband optical conductivity as a function of the incident photon energy at different y -axial strain: (a), (c) Results along the AC direction under different magnetic fields; (b), (d) the results along the ZZ direction under different magnetic fields.

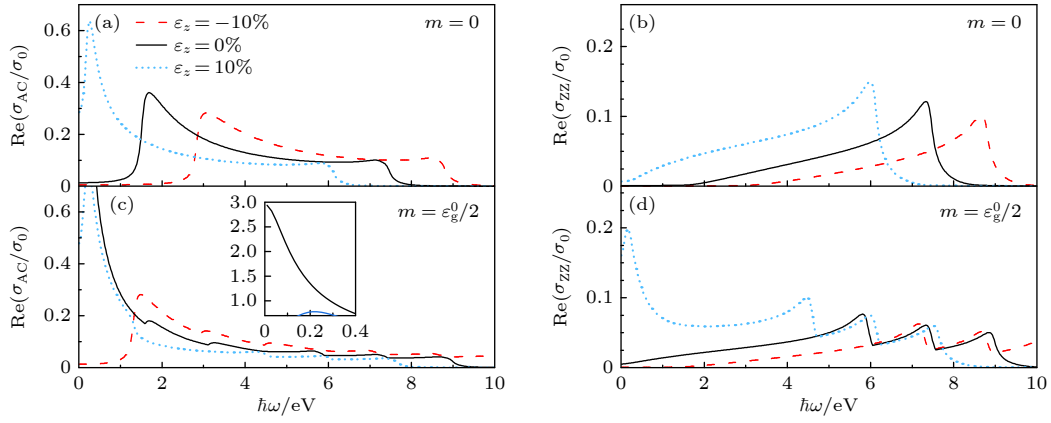


图 8 带间光电导率实部在不同 z 轴应变条件下随入射光能量的变化 (a), (c) 不同磁场下 AC 方向的结果; (b), (d) 不同磁场下 ZZ 方向的结果

Fig. 8. Real part of the interband optical conductivity as a function of the incident photon energy at different z -axial strain: (a), (c) Results along the AC direction under different magnetic fields; (b), (d) results along the ZZ direction under different magnetic fields.

禁止直接跃迁, 在考虑四重简并后, \hat{p}_{ZZ} 能与更高激发态进行非零耦合, ZZ 方向在远紫外处 ($\hbar\omega \approx 5\varepsilon_g^0$) 允许跃迁. 本文结果与文献中结果相吻合.

首先研究单轴应变下的黑磷烯光电导实部变化情况 (图 5—图 8). 在未施加磁场时 ($m = 0$), 对单层黑磷烯施加沿 x 轴方向应变 ε_x , 沿 AC 方向和 ZZ 方向的光电导率峰值均随压缩/拉伸应变的增大而增大/减小. 同时 AC 方向光电导峰的位置会随着压缩/拉伸产生红移/蓝移; 沿 ZZ 方向的偏移方向与 AC 方向相反. 施加同样大小的 y 轴应变 ε_y 对光电导率峰值的大小调制更为明显, 且光电导率峰值随着压缩/拉伸的变化趋势类似于 x 轴应变的情况. 值得注意的是, ZZ 方向出现光电导率峰值的位置几乎不受 y 轴应变的影响. 在沿 z 轴方向施加 $\pm 10\%$ 单轴应变时, 沿 AC 方向的光电导率峰值会随压缩/拉伸应变的增大而减小/增大, 同时峰的位置发生蓝移/红移. 沿 ZZ 方向的光电导率峰值随 z 轴应变的变化规律与沿 AC 方向类似. 整体而言, z 轴应变对光电导率峰值的调制与 x/y 轴应变相反, 并且在 ZZ 方向上, z 轴应变能够对光电导率峰值的位置进行有效调制, 而 x/y 轴应变的调制主要体现在峰值的大小上. 光电导的实部对应着能带中的跃迁通道, 其峰值直接受到带隙影响. 图 3 和图 4 说明了在 $[-20\%, +20\%]$ 应变范围内, 带隙随着 x/y 轴应变的增大而增大, 在 $[-10\%, +10\%]$ 应变范围内, 带隙随着 z 轴应变的增大而减小, 在未施加外场的情况下, 光电导率峰值的位置随着单轴应变发生相应变化.

施加磁场 ($m = \varepsilon_g/2$) 后, 黑磷烯带间光电导率的实部在 AC 方向和 ZZ 方向均分裂为 3 个峰, 这源于电子自旋分裂导致的能带分裂 (图 2). 本征状态下 ($m = 0$), AC 方向的光电导率峰值出现在 1.52 eV 附近. 施加磁场后, 本征光电导率峰值两侧出现新的峰值. 其中, 第 1 个峰值位于 0 eV 附近, 这是因为此时的带隙大小为 0, 对应于 $2 \rightarrow 3$ 跃迁; 第 2 个峰值位于本征峰值 (1.52 eV) 处, 对应于 $1 \rightarrow 3$ 和 $2 \rightarrow 4$ 跃迁; 第 3 个峰值位于 3.2 eV 附近, 对应于 $1 \rightarrow 4$ 跃迁. 施加磁场后本征峰值两侧出现了新的峰值, 而且各峰值大小较未施加磁场时出现了明显下降. 结果表明, 同时施加磁场和应变能明显提高 AC 方向低能量区域的光电导率, 黑磷烯的带间光电导率峰值比本征条件下弱, 光电导的峰值数目增加.

对于光电导率虚部变化情况, 由 Kramers-Kronig 关系可知, 光电导率虚部峰/谷出现的位置与实部峰值相同, 调制规律与实部类似, 如图 5 和图 6(b), (d) 所示. 在低能量区域, AC 方向光电导率虚部出现了向下凹陷的情况, 凹陷的位置反映了带隙的情况. 在高能量区域光电导率虚部出现了由“-”到“+”的符号变化, 虚部的正负情况可用于表面等离激元 (surface plasmon polariton, SPP) 的横电 (transverse electric, TE)、横磁 (transverse magnetic, TM) 传输模式的研究^[31].

同时施加 20% 的 x 和 y 轴、10% 的 z 轴应变下的 AC 和 ZZ 方向黑磷烯光电导如图 9(a), (b) 所示. 三轴应变的调制机制为面内应变与面外应变的竞争结果. 沿 AC 方向, 由于面内 x - y 轴应变对

于峰值位置以及峰值大小的调制均与面外 z 轴应变相反, 故在三轴应变下 AC 方向的光电导率峰值调制情况取决于面内和面外应变的大小. 沿 ZZ 方向, x - y 轴应变主要调制光电导率峰值的大小, z 轴应变能够对光电导率峰值的位置进行有效调制, 综合 3 种调制情况, ZZ 方向的光电导率峰值大小依赖于面内调制, 峰值位置依赖于面外调制. 通过三轴应变, 能够对黑磷烯的光学性质进行有效调制.

光电导峰值源于结构变化对带隙大小和跃迁概率的影响, 光电导峰值增大/减小意味着黑磷烯在该入射光能量附近能吸收更多/更少的光能. 峰值蓝移/红移表明黑磷烯吸收更高/更低能量跃迁概率增大.

3.3 电场与应变的光电导

垂直电场对带隙的调制呈现出较强的对称性, 接下来分析正向垂直电场下的黑磷烯光电导变化. 图 10 展示了外加电场对黑磷烯光电导的调制情况, 本征状态下施加能量大小为 V 的电场后, 黑磷烯带隙由 ε_g^0 变为 $\varepsilon_g^0 + V/2$, 当垂直电场能量为 3 eV 时, AC 方向的光电导率峰值边缘由 1.52 eV (ε_g^0) 蓝移至 3.2 eV ($\varepsilon_g^0 + 1.5$ eV), ZZ 方向光电导率峰值边缘由 7.6 eV ($5\varepsilon_g^0$) 蓝移至 7.93 eV ($5\varepsilon_g^0 + 0.33$ eV), AC 方向和 ZZ 方向的光电导率峰值偏移量对垂直电场的响应系数分别为 1/2 和 1/10^[32], AC 方向的光电导率峰值位移对垂直电场的响应远大于 ZZ 方向. 从图 10 还可以看出, 随着垂直电

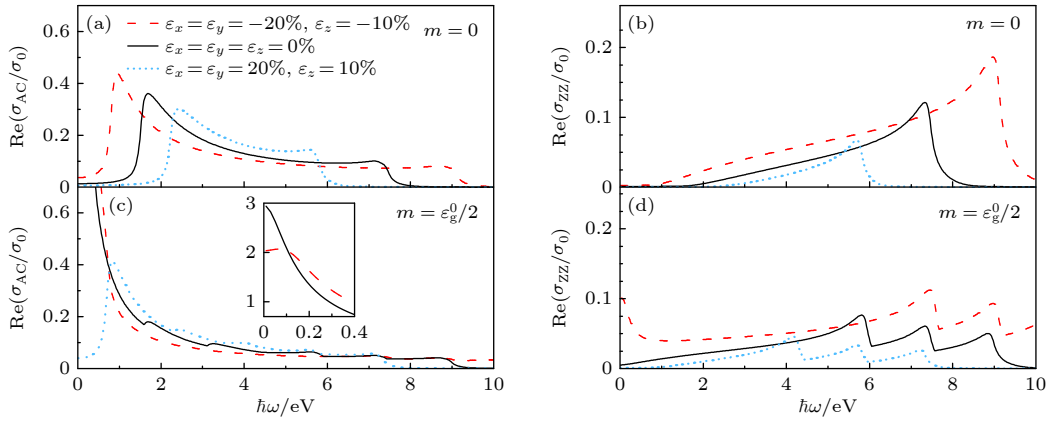


图 9 带间光电导率实部在三轴应变条件下随入射光能量的变化 (a), (c) 不同磁场下 AC 方向的结果; (b), (d) 不同磁场下 ZZ 方向的结果

Fig. 9. Real part of the interband optical conductivity as a function of the incident photon energy at different triaxial strains: (a), (c) Results along the AC direction under different magnetic fields; (b), (d) the results along the ZZ direction under different magnetic fields.

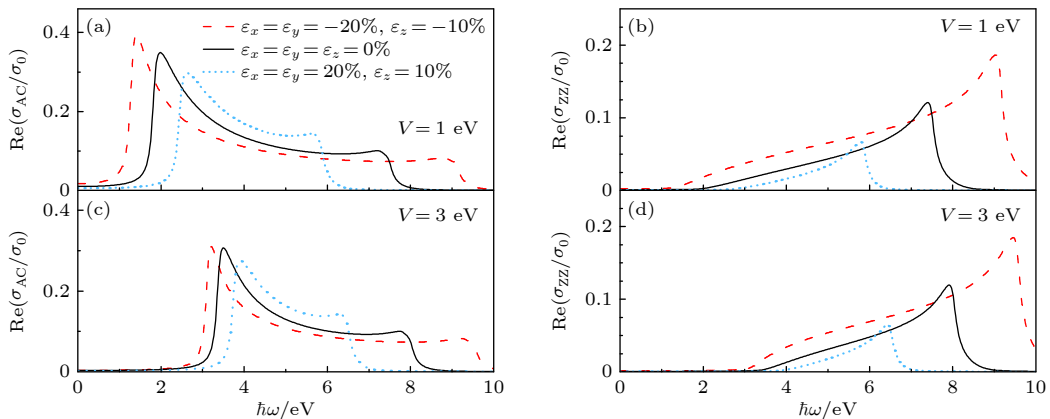


图 10 带间光电导率实部在三轴应变条件下随入射光能量的变化 (a), (c) 不同电场下 AC 方向的结果; (b), (d) 不同电场下 ZZ 方向的结果

Fig. 10. Real part of the interband optical conductivity as a function of the incident photon energy at different triaxial strains: (a), (c) Results along the AC direction under different electric fields; (b), (d) the results along the ZZ direction under different electric fields.

场的增大, AC 方向和 ZZ 方向的光电导率峰值大小均有所降低, 当垂直电场强度较大时, AC 方向对应变的响应较小, ZZ 方向仍保持较大的响应。

4 结 论

采用紧束缚近似方法探究了应变、垂直磁场和垂直电场对于黑磷烯能带结构的调制. 通过使用线性响应理论, 研究了沿 AC 和 ZZ 方向的黑磷纵向光电导率. 进而研究了黑磷烯光电导受应变、电场、磁场的调制情况。

研究结果表明施加单轴面内应变, 带隙随拉伸应变增大而单调增大, 施加单轴面外应变, 当拉伸应变为 12% 时带隙为 0; 能带在垂直磁场作用下发生分裂, 且磁场越大带隙越小, 直至能带交叠; 施加垂直电场强度越大, 带隙越大. 能带的调制直接反映在光电导特征上, 沿 x 和 y 轴方向的单轴应变对于光电导具有相似的调制机制, 施加拉伸/压缩应变, AC 方向光电导峰发生蓝/红移, 峰值降低/升高, ZZ 方向光电导峰发生红/蓝移, 峰值降低/升高, 但 y 轴的应变对 ZZ 方向光电导峰位的调制不明显. 因 z 轴拉伸应变为 12% 时带隙为 0, 沿 z 轴的单轴应变对于光电导的调制效果与面内应变调制结果不同, 表现出一临界应变, 非单调变化, 在 -10% — $+10\%$ 应变区单调变化. 同时施加不同大小的三轴应变时 ZZ 方向光电导峰红/蓝移较 AC 方向更明显. 施加磁场时黑磷烯光电导出现多个光电导峰, 不同的峰源于能带分裂产生的不同跃迁. 施加电场时黑磷烯光电导峰值随电压的增大而减小, 同时出现明显蓝移。

探究电场、磁场、不同轴向应变条件下能带调制以及光电导对此的响应变化, 对新型黑磷烯光电子器件设计有重要指导意义。

附录 A

黑磷烯的光电导 ((5) 式) 相关的系数 $\{\alpha_{\mathbf{k}}^u, \beta_{\mathbf{k}}^u\}$ 如下:

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}}^x &= 2t_1 a_1 \sin(k_x a_1 + \theta_{\mathbf{k}}) + t_2 a_2 \sin(k_x a_2 - \theta_{\mathbf{k}}) \\ &+ 2t_3 a_3 \cos(k_y b/2) \sin(k_x a_3 - \theta_{\mathbf{k}}) \\ &+ 2t_4 a \sin(k_x a/2) \cos(k_y b/2) \\ &+ t_5 a_5 \sin(k_x a_5 + \theta_{\mathbf{k}}), \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}}^y &= bt_1 \sin(k_y b/2) \cos(k_x a_1 + \theta_{\mathbf{k}}) \\ &+ bt_3 \sin(k_y b/2) \cos(k_x a_3 + \theta_{\mathbf{k}}) \\ &+ 2t_4 b \cos(k_x a/2) \sin(k_y b/2), \end{aligned} \quad (\text{A2})$$

$$\begin{aligned} \beta_{\mathbf{k}}^x &= -2t_1 a_1 \cos(k_y b/2) \cos(k_x a_1 + \theta_{\mathbf{k}}) \\ &+ t_2 a_2 \cos(k_x a_2 - \theta_{\mathbf{k}}) \\ &- t_5 a_5 \cos(k_x a_5 + \theta_{\mathbf{k}}), \end{aligned} \quad (\text{A3})$$

$$\beta_{\mathbf{k}}^y = b \sin(k_y b/2) [t_1 \sin(k_x a_1 + \theta_{\mathbf{k}}) - t_3 \sin(k_x a_3 - \theta_{\mathbf{k}})], \quad (\text{A4})$$

$$e^{i\theta_{\mathbf{k}}} = \sqrt{g_{\mathbf{k}}/g_{\mathbf{k}}^*}. \quad (\text{A5})$$

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al. 2004 *Science* **306** 666
- [2] Manzeli S, Ovchinnikov D, Pasquier D, Yazyev O V, Kis A 2017 *Nat. Rev. Mater.* **2** 17033
- [3] Li L K, Yu Y J, Ye G J, Ge Q Q, Ou X D, Wu H, Feng D L, Chen X H, Zhang Y B 2014 *Nat. Nanotechnol.* **9** 372
- [4] Liu H, Neal A T, Zhu Z, Luo Z, Xu X F, Tománek D, Ye P D 2014 *ACS Nano* **8** 4033
- [5] Xia F N, Wang H, Jia Y C 2014 *Nat. Commun.* **5** 4458
- [6] Jain A, McGaughey A J H 2015 *Sci. Rep.* **5** 8501
- [7] Qiao J S, Kong X H, Hu Z X, Yang F, Ji W 2014 *Nat. Commun.* **5** 4475
- [8] Ezawa M 2014 *New J. Phys.* **16** 115004
- [9] Tran V, Soklaski R, Liang Y F, Yang L 2014 *Phys. Rev. B* **89** 235319
- [10] Li L K, Kim J, Jin C H, et al. 2017 *Nat. Nanotechnol.* **12** 21
- [11] Kim J, Baik S S, Ryu S H, Sohn Y, Park S, Park B G, Denlinger J, Yi Y, Choi H J, Kim K S 2015 *Science* **349** 723
- [12] Peng X H, Wei Q, Copple A 2014 *Phys. Rev. B* **90** 085402
- [13] Rodin A S, Carvalho A, Castro Neto A H 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 176801
- [14] Fei R, Yang L 2014 *Nano Lett.* **14** 2884
- [15] Dai J, Zeng X C 2014 *J. Phys. Chem. Lett.* **5** 1289
- [16] Chen X L, Lu X B, Deng B C, et al. 2017 *Nat. Commun.* **8** 1672
- [17] Li L K, Yang F Y, Ye G J, et al. 2016 *Nat. Nanotechnol.* **11** 593
- [18] Pereira Jr J M, Katsnelson M I 2015 *Phys. Rev. B* **92** 075437
- [19] Zhou X Y, Lou W K, Zhai F, Chang K 2015 *Phys. Rev. B* **92** 165405
- [20] Phuong L T T, Phong T C, Yarmohammadi M 2020 *Sci. Rep.* **10** 9201
- [21] Keshtan M A M, Esmacilzadeh M 2015 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **48** 485301
- [22] Wang Y, Guo Y L, Wang Z K, et al. 2021 *ACS Nano* **15** 12069
- [23] Wang Y, Xu W, Fu L, et al. 2023 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **15** 54797
- [24] Wang Y, Xu W, Yang D Y, et al. 2023 *ACS Nano* **17** 24320
- [25] Li P K, Appelbaum I 2014 *Phys. Rev. B* **90** 115439
- [26] Le P T T, Yarmohammadi M 2019 *J. Magn. Magn. Mater.* **491** 165629
- [27] Rudenko A N, Katsnelson M I 2014 *Phys. Rev. B* **89** 201408
- [28] Yang C H, Zhang J Y, Wang G X, Zhang C 2018 *Phys. Rev. B* **97** 245408
- [29] Jiang J W, Park H S 2015 *Phys. Rev. B* **91** 235118
- [30] Khang P D, Davoudiniya M, Phuong L T T, Phong T C, Yarmohammadi M 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 15133
- [31] Yang C H, Zhang J Y, Wieser R, Xu W 2022 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **55** 085103
- [32] Le P T T, Mirabbaszadeh K, Yarmohammadi M 2019 *J. Appl. Phys.* **125** 193101

Interband optical conductivity in electromagnetic field modulated strained black phosphorene*

Bai Wen-Qing¹⁾²⁾³⁾ Yang Jiang-Tao¹⁾²⁾³⁾ Yang Cui-Hong^{1)2)3)†}
 Chen Yun-Yun¹⁾²⁾³⁾

1) (*School of Physics and Optoelectronic Engineering, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044, China*)

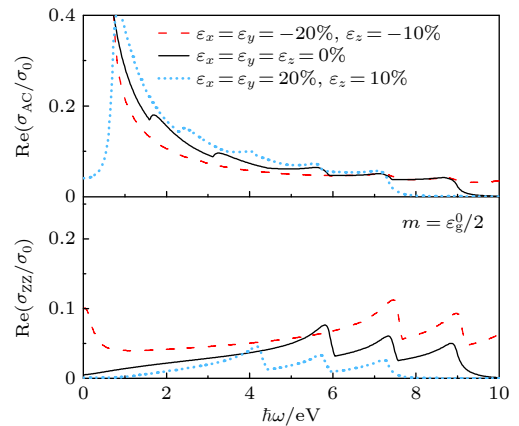
2) (*Jiangsu Key Laboratory for Optoelectronic Detection of Atmosphere and Ocean, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044, China*)

3) (*Jiangsu International Joint Laboratory on Meteorological Photonics and Optoelectronic Detection, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044, China*)

(Received 29 March 2024; revised manuscript received 8 May 2024)

Abstract

Black phosphorene (BP) has been widely investigated for its anisotropic and unique photoelectric properties. Strain, voltage and so on are commonly used to modulate the energy band structure and accordingly its photoelectric characteristics. In this study, we consider the energy band structure of BP in the vertical magnetic field, electric field, and in-plane/out-of-plane strains by using the tight-binding approximate Hamiltonian. The anisotropic frequency-dependent interband optical conductivity (IOC) of BP is investigated by using the Kubo formula in these modulation factors. Inherent asymmetry in band dispersion along the armchair (AC) direction and the zigzag (ZZ) direction leads to anisotropic IOC. The introduction of a vertical magnetic field induces band splitting, thereby generating multiple interband transition channels. In this case, the IOC along both the AC direction and the ZZ direction exhibits three peaks around the original peak position, and the magnitudes of the peaks are also modulated. With the increase of in-plane strain (from -20% to 20%), the band gap increases monotonically, and both the position and magnitude of the peaks vary with band gap changing. However, the band gap of BP undergoes a non-monotonic change under out-of-plane strain (from -20% to 20%), which is different from the change under in-plane strain. The band gap reaches a minimum value when a tensile strain of 12% is applied. Along the AC direction, the modulation of the IOC by in-plane strain is opposite to the modulation of out-of-plane strain ($\varepsilon_z < 12\%$), indicating a competitive effect when triaxial strains are applied. Along the ZZ direction, in-plane strain primarily modulates the peak magnitude, while out-of-plane strain effectively modulates not only the peak position but also the peak magnitude obviously. The modulation of the IOC by forward and reverse electric fields are symmetrical. The coefficient for the peak position shift due to the vertical electric field is $1/2$ in the AC direction and $1/10$ in the ZZ direction. By integrating various modulation factors, we achieve versatile control over the energy band and IOC of BP, providing theoretical support for the application of BP in optoelectronic devices.



Keywords: black phosphorene, band modulation, anisotropy, optical conductivity

PACS: 78.67.-n, 78.67.Wj, 78.20.-e, 78.56.-a

DOI: [10.7498/aps.73.20240445](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240445)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11547030).

† Corresponding author. E-mail: chyang@nuist.edu.cn

电磁场调制下的应变黑磷烯带间光电导

柏文庆 杨江涛 杨翠红 陈云云

Interband optical conductivity in electromagnetic field modulated strained black phosphorene

Bai Wen-Qing Yang Jiang-Tao Yang Cui-Hong Chen Yun-Yun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 137803 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240445

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240445>

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

拉伸形变及电场作用对黑磷烯吸附Si原子电学特性影响的密度泛函理论研究

Density functional theory study on influence of tensile deformation and electric field on electrical properties of Si atom adsorbed on black phosphorene

物理学报. 2021, 70(21): 216301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210812>

缺陷与掺杂共存的黑磷烯甲醛传感行为的电子理论

Electronic theoretical study on sensing behaviors of defects and doping coexistence of black phosphorene to formaldehyde

物理学报. 2020, 69(23): 237101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200990>

黑磷各向异性拉曼光谱表征及电学特性

Anisotropic Raman characterization and electrical properties of black phosphorus

物理学报. 2021, 70(3): 037801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201271>

非金属元素掺杂二硒化钨/石墨烯异质结对其肖特基调控的理论研究

Theoretical study on Schottky regulation of WSe₂/graphene heterostructure doped with nonmetallic elements

物理学报. 2020, 69(11): 117101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200080>

转角双层石墨烯在应变下的光电导率

Optical conductivity of twisted bilayer graphene under heterostrain

物理学报. 2021, 70(18): 187301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210110>

二维铁电In₂Se₃/InSe垂直异质结能带的应力调控

Strain control of two-dimensional ferroelectric In₂Se₃/InSe vertical heterojunction energy band

物理学报. 2021, 70(22): 227701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211158>