

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

张新成 廖文虎 左敏

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

Zhang Xin-Cheng Liao Wen-Hu Zuo Min

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 67, 107101 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20180213

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20180213>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I10>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[Al 掺杂和空位对 ZnO 磁性影响的第一性原理研究](#)

First-principles study of Al-doped and vacancy on the magnetism of ZnO

物理学报.2017, 66(6): 067202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.067202>

[一维扩展 t-J 模型中密度-自旋相互作用诱导的相分离](#)

Phase separation induced by density-spin interaction in one-dimensional extended t-J model

物理学报.2015, 64(18): 187105 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.187105>

[α-碳锗炔稳定性及性质模拟](#)

Molecular dynamics study on the stability and properties of α-Cgeyne

物理学报.2014, 63(20): 207303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.207303>

[La, Ce, Nd 掺杂对单层 MoS₂ 电子结构的影响](#)

Effects of La, Ce and Nd doping on the electronic structure of monolayer MoS₂

物理学报.2014, 63(6): 067301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.067301>

[量子点双链中电子自旋极化输运性质](#)

Spin-polarized transport through double quantum-dot-array

物理学报.2012, 61(15): 157201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.157201>

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*

张新成 廖文虎[†] 左敏

(吉首大学物理与机电工程学院, 吉首 416000)

(2018年1月28日收到; 2018年3月5日收到修改稿)

基于紧束缚近似下的低能有效哈密顿模型和久保线性响应理论, 研究了外部非共振圆偏振光作用下单层二硫化钼 (MoS_2) 电子结构及其自旋/谷输运性质. 研究表明: 单层 MoS_2 布里渊区 K 谷和 K' 谷附近自旋依赖子带间的能隙随着非共振右旋圆偏振光引起的有效耦合能分别线性增大和先减小后增大, 随着非共振左旋圆偏振光引起的有效耦合能分别先减小后增大和线性增大, 实现了系统能带结构有趣的半导体-半金属-半导体转变. 此外, 单层 MoS_2 在外部非共振圆偏振光作用下, 呈现有趣的量子化横向霍尔电导和自旋/谷霍尔电导, 自旋极化率在非共振右/左旋圆偏振光有效耦合能 ± 0.79 eV 附近达到最大并发生由正到负或由负到正的急剧转变, 谷极化率随着非共振圆偏振光有效耦合能先增大后减小并在其绝对值 $0.79-0.87$ eV 范围内达到 100%. 因而, 可以利用外部非共振圆偏振光将单层 MoS_2 调制成自旋/谷以及光电特性优异的新带隙材料.

关键词: 二硫化钼, 非共振圆偏振光, 电子结构, 自旋/谷霍尔电导

PACS: 71.10.Hf, 72.25.Dc, 73.22.-f, 73.50.-h

DOI: 10.7498/aps.67.20180213

1 引言

近 10 多年来, 以石墨烯为代表的二维材料因其优异的物理性质和器件设计方面的应用前景引起了物理、材料、信息等领域的广泛关注^[1,2]. 边缘功能化^[3]、微纳结构化^[4]、化学掺杂^[5]等方法能够在一定程度上打开石墨烯的带隙, 但无带隙的本征能带结构^[6,7]使得石墨烯基场效应晶体管截止电流较高、电流开关比较低^[8]. 与石墨烯几何结构类似的单层二硫化钼 (MoS_2) 是直接带隙半导体, 具有自旋/谷霍尔效应等物理特性^[9-13], 从器件设计和应用角度看比石墨烯更加优异, 近年来成为新型半导体材料的研究热点之一^[14-20].

2011 年, Kis 等^[14]成功地制备了单层 MoS_2 场效应晶体管, 后来 Liu 研究组^[15]采用原子层沉积技

术成功制作出迁移率高达 $517 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 的 MoS_2 场效应晶体管, Zhang 等^[16]利用离子液体作为栅极制造出具有较高空穴迁移率的单层 MoS_2 场效应晶体管. 2012 年, Xiao 等^[17]和 Cao 等^[18]发现单层 MoS_2 在六边形布里渊区顶点附近具有“谷”状能带结构, 相邻顶点的谷对左、右旋光具有近乎完美的选择性. 香港大学和哥伦比亚大学的实验组通过圆偏振光抽运方法验证了单层 MoS_2 具有偏振光选择性和谷霍尔效应^[19,20]. 2016 年, Sengupta 和 Bellotti^[21]研究了非共振圆偏振光作用下二维过渡族金属硫化物自旋霍尔电导, 单层 MoS_2 在应力和磁近邻交换场作用下的输运性质也受到关注^[22,23], 外部电场和近邻交换相互作用被证明是调控单层 MoS_2 能带结构^[24-26]的有效手段. 然而, 很少有相关工作涉及外部非共振圆偏振光对单层 MoS_2 电子

* 国家自然科学基金 (批准号: 11664010, 11264013)、湖南省自然科学基金 (批准号: 2017JJ2217, 12JJ4003)、湖南省教育厅优秀青年基金 (批准号: 14B148) 和吉首大学科研项目 (批准号: JGY201763, Jdy16021) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: whliao2007@aliyun.com

能带结构和自旋/谷输运特性的影响, 本文针对这方面的问题开展研究.

利用紧束缚近似下的低能有效哈密顿模型和久保线性响应理论, 研究了外部非共振圆偏振光对单层 MoS₂ 电子能带结构及其自旋/谷输运性质的影响. 研究表明: 单层 MoS₂ 布里渊区 K 谷和 K' 谷附近自旋依赖的子带间能隙随着非共振右旋圆偏振光引起的有效耦合能分别线性增大和先减小后增大, 随着非共振左旋圆偏振光引起的有效耦合能分别先减小后增大和线性增大, 实现了有趣的半导体-半金属-半导体转变. 在没有非共振圆偏振光作用时, 单层 MoS₂ 量子化自旋霍尔电导为 0、谷霍尔电导为 $2e^2/h$; 当非共振圆偏振光有效耦合能绝对值在 0.79—0.87 eV 范围内变化时, 系统自旋霍尔电导为 $-2e^2/h$ 、谷霍尔电导为 0; 当非共振圆偏振光引起的有效耦合能在其他范围内变化时, 量子化自旋/谷霍尔电导与无外场时相同. 系统自旋极化率在非共振圆偏振光有效耦合能 ± 0.79 eV 附近达到最大并发生由正到负或由负到正的急剧转变, 谷极化率随着非共振圆偏振光有效耦合能先增大后减小, 在非共振圆偏振光有效耦合能绝对值 0.79—0.87 eV 范围内达到 100%. 因此, 外部非共振圆偏振光是调控单层 MoS₂ 量子化霍尔电导、自旋/谷霍尔电导以及自旋/谷极化的有效手段.

2 模型与方法

如图 1 所示, 我们构建了一个基于单层 MoS₂ 的场效应晶体管模型, 其中单层 MoS₂ 置于中心区域并受到非共振圆偏振光的辐照, 系统有效哈密顿量为 [10,17,27,28]

$$H_{s_z}^{\tau} = at(\tau k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + \frac{\Delta}{2} \sigma_z - \frac{\lambda \tau}{2} (\sigma_z - 1) s_z + \tau \Delta_{\Omega} \sigma_z, \quad (1)$$

其中晶格常数 $a = 3.193 \text{ \AA}$, $t = 1.10 \text{ eV}$ 为最近邻原子间的跃迁能, $\tau = +/-$ 表示 K/K' 谷, $k_{x/y}$ 为波矢在 x/y 方向的分量, $\sigma_i (i = x, y, z)$ 为泡利矩阵, 价带与导带之间的带隙 $\Delta = 1.66 \text{ eV}$, $2\lambda = 0.15 \text{ eV}$ 是价带顶因自旋轨道耦合而引发的自旋劈裂能, $s_z = \pm 1$ 代表自旋向上/向下, Δ_{Ω} 表示非共振圆偏振光场引起的耦合能.

此外, 非共振圆偏振光引起的电磁势可以描述为

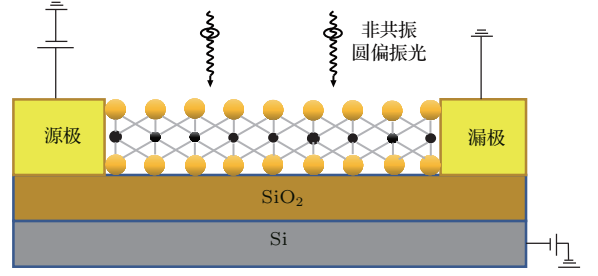


图 1 由金属源极、漏极和可调制背电极构成 MoS₂ 纳米场效应管模型图, 其中心区域受到非共振圆偏振光的辐照, 黑色小球代表钼原子 (Mo), 黄色小球代表硫原子 (S)
Fig. 1. Schematic representation of the MoS₂ based field effect transistor, consisting of metallic source, drain and electrically modulated back-gate, with the central region irradiated by the off-resonant circularly polarized light (demonstrated by the wave lines), and the black and yellow balls indicates the molybdenum (Mo) and sulfur (S) atoms, respectively.

$$\mathbf{A}(t) = [\pm A \sin(\Omega t), A \cos(\Omega t)], \quad (2)$$

其中 + 和 - 分别表示右旋和左旋圆偏振光, Ω 为非共振圆偏振光的频率, A 为非共振圆偏振光的振幅. 电磁势满足时间周期性条件, 即 $\mathbf{A}(t+T) = \mathbf{A}(t)$, 周期 $T = 2\pi/\Omega$. 通过正则变换 $\hbar k_i \rightarrow \hbar k_i - e\mathbf{A}(t)$ 获得非共振圆偏振光辐照对体系的影响, 含时哈密顿量为

$$H^{\tau}(t) = -\frac{ateA}{\hbar} [\pm \tau \sin(\Omega t) \sigma_x + \cos(\Omega t) \sigma_y]. \quad (3)$$

当非共振圆偏振光光子能量远大于最近邻跃迁能时 ($\hbar\Omega \gg t$), 非共振圆偏振光对体系的影响可通过 Floquet 理论 [28,29] 简化为有效静态 (不含时的) 哈密顿量 ΔH^{τ} . 非共振圆偏振光属于高频弱场, 不直接激发体系中的电子, 而是通过光子吸收和发射过程改变体系的电子能带结构. 先吸收光子后发射光子过程中对体系哈密顿量的改变为 $H_{+1}^{\tau} \frac{1}{\hbar\omega - (\hbar\omega + \hbar\Omega)} H_{-1}^{\tau}$, 其中 $\hbar\omega$ 和 $\hbar\Omega$ 分别为电子能量和光子能量, 先发射光子后吸收光子过程中对体系哈密顿量的改变为 $H_{-1}^{\tau} \frac{1}{\hbar\omega - (\hbar\omega - \hbar\Omega)} H_{+1}^{\tau}$, 其中,

$$\begin{aligned} H_{\pm 1}^{\tau} &= \frac{1}{T} \int_0^T H^{\tau}(t) \exp(\mp i\Omega t) dt \\ &= \pm \frac{eatA}{\hbar} \frac{1}{T} \int_0^T \exp(\mp i\Omega t) \\ &\quad \times [\pm \tau \sin(\Omega t) \sigma_x + \cos(\Omega t) \sigma_y] dt \\ &= \pm \frac{eatA}{2\hbar} (\pm i\tau \sigma_x \mp \sigma_y). \end{aligned} \quad (4)$$

因此, 非共振圆偏振光对体系电子能带结构的影响 [28,30] 为

$$\begin{aligned}\Delta H^\tau &= \frac{1}{\hbar\Omega} [H_{+1}^\tau, H_{-1}^\tau] + o(A^4) \\ &= \pm \frac{e^2 a^2 t^2 A^2}{\hbar^3 \Omega} \cdot \tau \sigma_z + o(A^4).\end{aligned}\quad (5)$$

忽略高阶小量后, 获得非共振圆偏振光辐照引起的有效耦合能 $\Delta_\Omega = \pm a^2 t^2 e^2 A^2 / \hbar^3 \Omega$, 其中 + 和 - 分别表示右旋和左旋圆偏振光.

通过对角化公式 (1) 中的哈密顿量, 可以得到如下色散关系:

$$\begin{aligned}E_{c/v,s_z}^\tau &= \pm \sqrt{a^2 t^2 k^2 + \left(\frac{\Delta - \lambda \tau s_z + 2\tau \Delta_\Omega}{2}\right)^2} \\ &\quad + \frac{\lambda \tau s_z}{2},\end{aligned}\quad (6)$$

其中, $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, 根号外的 + 和 - 分别对应导带 (c) 和价带 (v), 对应的导带与价带波函数分别为

$$\psi_{c,s_z}^\tau = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \cos \theta} \\ \sqrt{1 - \cos \theta} e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

和

$$\psi_{v,s_z}^\tau = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{1 - \cos \theta} \\ \sqrt{1 + \cos \theta} e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

其中, $\theta = \arctan[2atk/(\Delta - \lambda \tau s_z + 2\tau \Delta_\Omega)]$, $\varphi = \arctan(k_y/k_x)$.

利用久保线性响应理论 [31-34], 可以得到自旋和谷依赖的横向霍尔电导:

$$\begin{aligned}\sigma_{xy,s_z}^\tau &= \frac{ie^2 \hbar}{S} \sum_{c \neq v} \sum_k \frac{f(E_{c,s_z}^\tau) - f(E_{v,s_z}^\tau)}{(E_{c,s_z}^\tau - E_{v,s_z}^\tau)^2 + \eta^2} \\ &\quad \times \left\langle \psi_{c,s_z}^\tau \left| \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H_{s_z}^\tau}{\partial k_x} \right| \psi_{v,s_z}^\tau \right\rangle \\ &\quad \times \left\langle \psi_{v,s_z}^\tau \left| \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H_{s_z}^\tau}{\partial k_y} \right| \psi_{c,s_z}^\tau \right\rangle,\end{aligned}\quad (9)$$

其中 S 为系统面积,

$$f(E_{c/v,s_z}^\tau) = \{1 + \exp[(E_{c/v,s_z}^\tau - E_F)/k_B T]\}^{-1}$$

为费米-狄拉克分布函数, η 为无穷小量. 可以进一步得到系统的自旋霍尔电导 [35,36]

$$\sigma_{xy}^s = (\sigma_{xy,\uparrow}^K + \sigma_{xy,\uparrow}^{K'}) - (\sigma_{xy,\downarrow}^K + \sigma_{xy,\downarrow}^{K'}) \quad (10)$$

和谷霍尔电导

$$\sigma_{xy}^v = (\sigma_{xy,\uparrow}^K + \sigma_{xy,\downarrow}^K) - (\sigma_{xy,\uparrow}^{K'} + \sigma_{xy,\downarrow}^{K'}), \quad (11)$$

其中 \uparrow 和 \downarrow 分别表示自旋向上和自旋向下.

此外, 系统的纵向电导 [32,33] 为

$$\begin{aligned}\sigma_{xx,s_z}^\tau &= \frac{ie^2 \hbar}{S} \sum_{c \neq v} \sum_k \frac{f(E_{c,s_z}^\tau) - f(E_{v,s_z}^\tau)}{(E_{c,s_z}^\tau - E_{v,s_z}^\tau)^2} \\ &\quad \times \frac{\eta}{(E_{c,s_z}^\tau - E_{v,s_z}^\tau)^2 + \eta^2} \\ &\quad \times \left\langle \psi_{c,s_z}^\tau \left| \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H_{s_z}^\tau}{\partial k_x} \right| \psi_{v,s_z}^\tau \right\rangle^2.\end{aligned}\quad (12)$$

根据纵向电导, 可以进一步得到系统自旋极化率

$$P_s = \frac{\sigma_{xx,\uparrow}^K + \sigma_{xx,\uparrow}^{K'} - (\sigma_{xx,\downarrow}^K + \sigma_{xx,\downarrow}^{K'})}{\sigma_{xx,\uparrow}^K + \sigma_{xx,\uparrow}^{K'} + \sigma_{xx,\downarrow}^K + \sigma_{xx,\downarrow}^{K'}} \quad (13)$$

和谷极化率 [37]

$$P_v = \frac{\sigma_{xx,\uparrow}^K + \sigma_{xx,\downarrow}^K - (\sigma_{xx,\uparrow}^{K'} + \sigma_{xx,\downarrow}^{K'})}{\sigma_{xx,\uparrow}^K + \sigma_{xx,\downarrow}^K + \sigma_{xx,\uparrow}^{K'} + \sigma_{xx,\downarrow}^{K'}}. \quad (14)$$

3 结果与讨论

由于 MoS₂ 谷电子对光的手性选择性, 使得特定振幅和频率的非共振右旋或左旋圆偏振光只能修饰 K 谷或 K' 谷的电子, 从而产生能隙的变化, 但是此时的能隙不是平衡态布洛赫电子的能隙, 而是非平衡态 Floquet 能隙. 图 2 给出了单层 MoS₂ 布里渊区 K/K' 谷附近自旋依赖的价带与导带子带间能隙随非共振圆偏振光引起的有效耦合能的变化关系. 系统布里渊区 K 谷附近自旋向上、向下价带与导带间的能隙 (如图 2 中正能段黑色实线和红色虚线所示) 随着非共振右旋圆偏振光引起的有效耦合能增强呈线性增大, 布里渊区 K' 谷附近自旋向上、向下价带与导带间的能隙 (如图 2 中正能段蓝色点虚线和绿色点线所示) 随着非共振右旋圆偏振光引起的耦合能增强先减小后增大, 在非共振右旋圆偏振光引起的耦合能 0.79 和 0.87 eV 附近自旋向上和向下价带与导带间的能隙减小到趋于 0, 此时 MoS₂ 表现出半金属性. 此外, 单层 MoS₂ 布里渊区 K 谷附近价带与导带间的能隙随非共振左旋圆偏振光引起的有效耦合能先减小后增大 (如图 2 中负能段黑色实线和红色虚线所示), 在非共振左旋圆偏振光引起的耦合能 -0.79 和 -0.87 eV 附近发生半导体-半金属相变, K' 谷附近自旋向上、向下价带与导带间的能隙 (如图 2 中负能段蓝色点虚线和绿色点线所示) 随着非共振左旋圆偏振光引起的有效耦合能增强线性增大. 由此可见, 外部非共振圆偏振光可引起单层 MoS₂ 能带结构有趣的半导

体-半金属-半导体转变, 从而引起系统自旋/谷输运特性的有趣变化(如图3—图6所示).

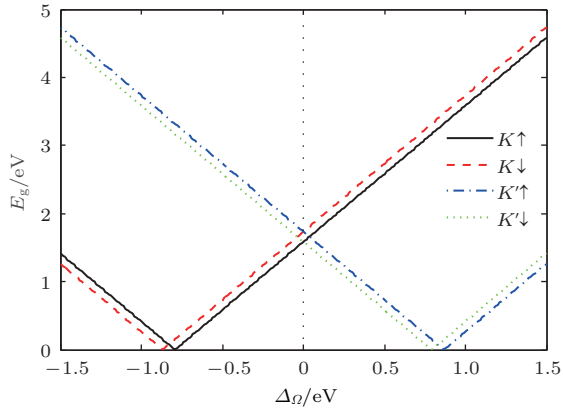


图2 单层 MoS₂ 在 K/K' 谷附近价带与导带间能隙(以 eV 为单位) 随非共振圆偏振光引起的有效耦合能 Δ_Ω 的变化关系, 其中黑色实线和红色虚线分别表示 K 谷附近自旋向上和自旋向下价带与导带间的能隙, 蓝色点虚线和绿色点线分别表示 K' 谷附近自旋向上和自旋向下价带与导带间的能隙

Fig. 2. Energy gap E_g (in units of eV) of the monolayer MoS₂ as a function of the effective coupling energy Δ_Ω induced from the external off-resonant circularly polarized light where the (black) solid and (red) dashed line demonstrates energy gap from the spin-up and -down subbands at the vicinity of K valley, while that for the K' valley is denoted by the (blue) dashed-dot and (green) dot line, respectively.

利用久保线性响应理论, 进一步研究了非共振圆偏振光作用下单层 MoS₂ 的量子化横向霍尔电导. 当 MoS₂ 费米能级处于价带与导带间的带隙中时, 系统自旋/谷依赖的横向霍尔电导趋于量子化^[24,32,35]. 如图3所示, 系统横向霍尔电导在非共振右旋、左旋圆偏振光作用下的变化规律类似. 下面以单层 MoS₂ 在非共振右旋圆偏振光作用下的情形为例展开讨论. 当非共振右旋圆偏振光引起的耦合能在 0—0.79 eV 以及 0.87—1.50 eV 范围内变化时, 如图3所示, 单层 MoS₂ 布里渊区 K 谷和 K' 谷自旋向上量子化霍尔电导分别为 $e^2/2h$ 和 $-e^2/2h$; 当非共振右旋圆偏振光引起的耦合能在 0.79—0.87 eV 范围内变化时, K 谷自旋向上量子化霍尔电导由 $e^2/2h$ 为 $-e^2/2h$ 、自旋向下量子化霍尔电导仍为 $e^2/2h$ (如图3(a)中正能段黑色实线和红色虚线所示), K' 谷自旋向上横向量子化霍尔电导为 $-e^2/2h$ 、自旋向下量子化霍尔电导由 $-e^2/2h$ 跃变为 $e^2/2h$ (如图3(b)中正能段蓝色点虚线和绿色点线所示).

图4给出了单层 MoS₂ 量子化自旋霍尔电导(黑色实线所示)和谷霍尔电导(红色虚线所示)

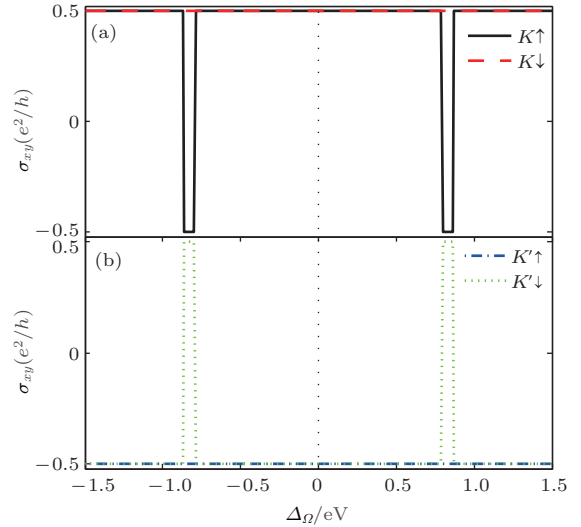


图3 单层 MoS₂ 横向霍尔电导(以 e^2/h 为单位) 随非共振圆偏振光引起的有效耦合能 Δ_Ω 的变化关系 (a) 黑色实线和红色虚线分别表示 K 谷附近自旋向上和自旋向下横向霍尔电导; (b) 蓝色点虚线和绿色点线分别表示 K' 谷附近自旋向上和自旋向下横向霍尔电导

Fig. 3. Transversal Hall conductance σ_{xy} (in units of e^2/h) of the monolayer MoS₂ as a function of the effective coupling energy Δ_Ω induced from the external off-resonant circularly polarized light: (a) The (black) solid and (red) dashed line denotes the spin-up and -down transversal Hall conductance at the vicinity of K valley, while that for K' valley in (b) is illustrated by the (blue) dashed-dot and (green) dot line, respectively.

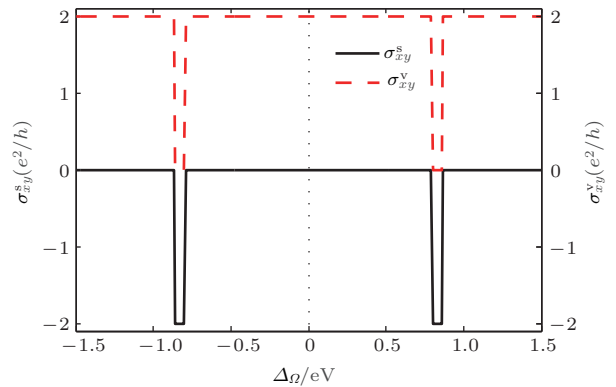


图4 单层 MoS₂ 横向量子化自旋霍尔电导(以 e^2/h 为单位) 和谷霍尔电导(以 e^2/h 为单位) 随非共振圆偏振光引起的有效耦合能 Δ_Ω 的变化关系, 其中黑色实线和红色虚线分别表示自旋霍尔电导和谷霍尔电导

Fig. 4. Transversal quantized spin conductance σ_{xy}^s (in units of e^2/h) and σ_{xy}^v (in units of e^2/h) of the monolayer MoS₂ as a function of the effective coupling energy Δ_Ω induced from the external off-resonant circularly polarized light, as has been denoted by the (black) solid and (red) dashed line, respectively.

随非共振圆偏振光引起的有效耦合能的变化. 非共振左旋圆偏振光引起的有效耦合能在 -1.50 — -0.87 eV 范围内变化时, 系统量子化自旋霍尔电导为 0 (如图 4 中黑色实线所示)、谷霍尔电导为 $2e^2/h$ (如图 4 中红色虚线所示). 有趣的是, 当非共振左旋圆偏振光引起的有效耦合能在 -0.87 — -0.79 eV 范围内变化时, 如图 4 中黑色实线和红色虚线所示, 系统自旋霍尔电导为 $-2e^2/h$ 、谷霍尔电导由 $2e^2/h$ 跃变为 0 . 当非共振光左电旋圆偏振光引起的有效耦合能在 -0.79 — 0 eV 范围内变化时, 系统自旋霍尔电导消失、谷霍尔电导从 0 跃变到 $2e^2/h$. 此外, 如图 4 中黑色实线所示, 当非共振光右旋圆偏振光引起的有效耦合能在 0.79 — 0.87 eV 范围内变化时, 系统自旋霍尔电导从 0 — 0.79 eV 范围内的 0 跃变到 $-2e^2/h$ 、谷霍尔电导 (如图 4 中红色虚线所示) 由 $2e^2/h$ 跃变为 0 . 当非共振光右旋圆偏振光引起的耦合能在 0.87 — 1.50 eV 范围内变化时, 系统自旋霍尔电导为 0 、谷霍尔电导 (如图 4 中红色虚线所示) 由 0 跃变到 $2e^2/h$. 因而, 系统量子化自旋霍尔电导和谷霍尔电导^[24,35]敏感地依赖于电子的自旋/谷自由度以及外部非共振光偏振光引起的有效耦合能.

进一步研究了单层 MoS₂ 纵向电导随非共振圆偏振光引起的有效耦合能的变化关系. 如图 5 中的黑色实线和红色虚线所示, 单层 MoS₂ 布里渊区 K 谷附近自旋向上、向下纵向电导在非共振光左旋圆偏振光引起的耦合能 -0.79 和 -0.87 eV 附近呈现共振峰 (共振峰的能量位置与图 2 中的半导体-半金属相变能量点以及图 3 中的 K 谷横向霍尔电导跃变能量对应). 另外, 如图 5 中蓝色点虚线和绿色点线所示, 单层 MoS₂ 布里渊区 K' 谷附近自旋向上、向下纵向电导在非共振光右旋圆偏振光引起的耦合能 0.79 和 0.87 eV 附近呈现共振峰, 共振峰的能量位置与图 2 中的相变能量点以及图 3 中的 K' 谷横向霍尔电导跃变能量一一对应.

图 6 给出了单层 MoS₂ 自旋极化率和谷极化率随非共振圆偏振光引起的耦合能的变化关系. 非共振左旋圆偏振光引起的耦合能在 -0.79 — 0 eV 范围内变化时, 系统自旋极化率 (如图 6 中负能段黑色实线所示) 随着非共振左旋圆偏振光引起的耦合能增强先慢后快增大, 在非共振左旋圆偏振光引起的耦合能 -0.79 eV 附近呈现由正到负的急剧

转变, 系统谷极化率 (如图 6 中负能段红色虚线所示) 先随着非共振左旋圆偏振光引起的耦合能增强先快后慢增大, 在非共振左旋圆偏振光有效耦合能 -0.87 — -0.79 eV 范围内达到 100% , 然后随着非

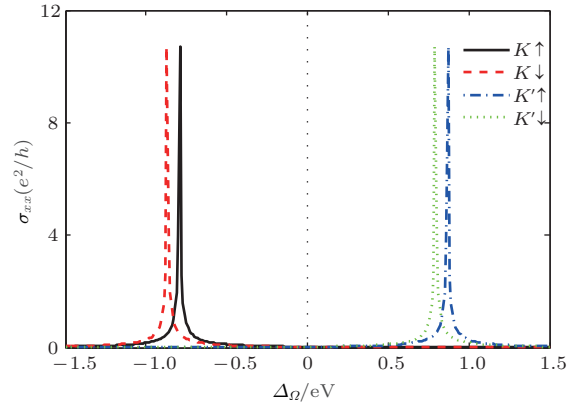


图 5 单层 MoS₂ 布里渊区 K/K' 谷附近纵向电导 (以 e^2/h 为单位) 随非共振圆偏振光引起的耦合能 $\Delta\Omega$ 的变化关系, 其中黑色实线、红色虚线分别表示 K 谷附近自旋向上、自旋向下纵向电导, 蓝色点虚线和绿色点线分别表示 K' 谷附近自旋向上和自旋向下纵向电导

Fig. 5. Longitudinal conductance σ_{xx} (in units of e^2/h) at the vicinity of K/K' valley for monolayer MoS₂ as a function of the effective coupling energy $\Delta\Omega$ induced from the external off-resonant circularly polarized light, where the (black) solid and (red) dashed line denotes the spin-up and -down longitudinal conductance at the vicinity of K valley, while the (blue) dashed-dot and (green) dot line gives the spin-up and -down longitudinal conductance at the vicinity of K' valley, respectively.

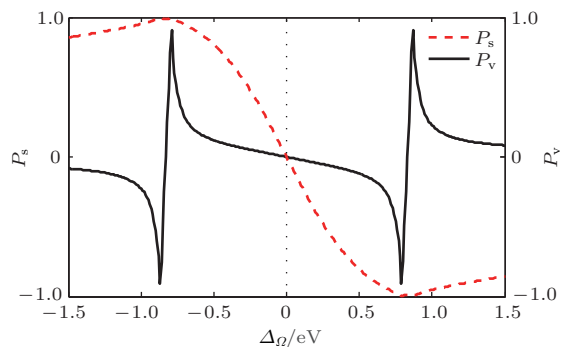


图 6 单层 MoS₂ 纵向电导自旋极化率 P_s 和谷极化率 P_v 随非共振圆偏振光引起的有效耦合能 $\Delta\Omega$ 的变化关系, 其中黑色实线和红色虚线分别表示自旋极化率 P_s 和谷极化率 P_v

Fig. 6. Longitudinal conductance spin and valley polarization rate (denoted by P_s and P_v , respectively) for monolayer MoS₂ as a function of the effective coupling energy $\Delta\Omega$ induced from the external off-resonant circularly polarized light, as has been illustrated by the (black) solid and (red) dashed line, respectively.

共振圆偏振光有效耦合能增强缓慢减小(谷极化率一直保持在90%以上). 此外, 当非共振右旋圆偏振光引起的耦合能在0—0.79 eV范围内变化时(如图6中正能段黑色实线所示), 系统自旋极化率随着非共振右旋圆偏振光引起的耦合能增强先慢后快增强, 在非共振右旋圆偏振光引起的耦合能为0.79 eV附近呈现由负到正的急剧转变, 系统谷极化率(如图6中正能段红色虚线所示)先随着非共振右旋圆偏振光引起的耦合能增强先快后慢增大, 在非共振右旋圆偏振光有效耦合能0.79—0.87 eV范围内达到100%, 然后随着非共振圆偏振光引起的有效耦合能增强缓慢减小(谷极化率一直超过90%). 可见, 利用非共振圆偏振光有望在单层MoS₂上实现100%的谷极化, 从而用于谷电子器件设计; 在特定非共振圆偏振光引起的有效耦合能附近实现系统自旋极化的急速反转, 这对基于MoS₂的新型高速自旋电子器件设计具有一定的指导意义.

4 结 论

利用紧束缚近似下的低能有效哈密顿模型和久保线性响应理论, 研究了外部非共振圆偏振光对单层MoS₂电子能带结构、横向霍尔电导、纵向电导及其自旋/谷输运性质的影响. 研究表明, 单层MoS₂布里渊区K谷和K'谷附近能隙随着非共振右旋圆偏振光引起的有效耦合能增强分别呈线性增大和先减小后增大, 随着非共振左旋圆偏振光引起的有效耦合能增强分别先减小后增大和线性增大, 实现有趣的半导体-半金属-半导体转变. 此外, 非共振圆偏振光有效耦合能绝对值在0.79—0.87 eV范围内变化时, 系统自旋霍尔电导为 $-e^2/2h$ 、谷霍尔电导消失. 在非共振右/左旋圆偏振光有效耦合能 ± 0.79 eV附近, 系统自旋极化率呈现由负到正或由正到负的急剧转变. 系统谷极化率随着非共振左旋和右旋圆偏振光有效耦合能增强而增大, 在非共振圆偏振光有效耦合能绝对值0.79—0.87 eV范围内接近于100%. 总之, 外部非共振圆偏振光是调控单层MoS₂量子化霍尔电导、自旋/谷霍尔电导以及纵向电导自旋/谷极化的有效手段, 可利用外部电磁场实现单层MoS₂完全谷极化或自旋极化, 为基于低维过渡族金属硫化物的新型高速自旋/谷电子器件设计提供理论基础.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I 2005 *Nature* **438** 197
- [3] Balog R, Jørgensen B, Nilsson L, Andersen M, Rienks E, Bianchi M, Fanetti M, Laegsgaard E, Baraldi A, Lizzit S, Sljivancanin Z, Besenbacher F, Hammer B, Pedersen T G, Hofmann P, Hornekaer L 2010 *Nature Mater.* **9** 315
- [4] Li X, Wang X, Zhang L, Lee S, Dai H 2008 *Science* **319** 1229
- [5] Zhou S Y, Gweon G H, Fedorov A V, First P N, de Heer W A, Lee D H, Guinea F, Castro Neto A H, Lanzara A 2007 *Nature Mater.* **6** 770
- [6] Xia F, Farmer D B, Lin Y, Avouris P 2010 *Nano Lett.* **10** 715
- [7] Guinea F, Katsnelson M I, Geim A K 2010 *Nat. Phys.* **6** 30
- [8] Chen J H, Jang C, Xiao S, Ishigami M, Fuhrer M S 2008 *Nat. Nanotechnol.* **3** 206
- [9] Li Z, Carbotte J P 2012 *Phys. Rev. B* **86** 205425
- [10] Majidi L, Rostami H, Asgari R 2014 *Phys. Rev. B* **89** 045413
- [11] Splendiani A, Sun L, Zhang Y, Li T, Kim J, Chim C Y, Galli G, Wang F 2010 *Nano Lett.* **10** 1271
- [12] Wang Q H, Kalantar-Zadeh K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 699
- [13] Mak K F, Lee C, Hone J, Shan J, Tony F H 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 136805
- [14] Radisavljevic B, Radenovic A, Brivio J, Giacometti V, Kis A 2011 *Nat. Nanotechnol.* **6** 147
- [15] Liu H, Peide D Y 2012 *IEEE Electron Dev. Lett.* **33** 546
- [16] Zhang Y, Ye J, Matsushashi Y, Iwasa Y 2012 *Nano Lett.* **12** 1136
- [17] Xiao D, Liu G B, Feng W X, Xu X D, Yao W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 196802
- [18] Cao T, Wang G, Han W P, Ye H Q, Zhu C R, Shi J R, Niu Q, Tan P H, Wang E G, Liu B L, Feng J 2012 *Nat. Commun.* **3** 887
- [19] Mak K F, He K, Shan J, Heinz T F 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 494
- [20] Zeng H, Dai J, Yao W, Xiao D, Cui X 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 490
- [21] Sengupta P, Bellotti E 2016 *Appl. Phys. Lett.* **108** 211104
- [22] Zheng H L, Yang B S, Wang D D, Han R L, Du X B, Yan Y 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 132403
- [23] Yarmohammadi M 2017 *J. Magnet. Magnet. Mater.* **426** 621
- [24] Wang S, Wang J 2015 *Physica B* **458** 22
- [25] Yin Z Y, Li H, Li H, Jiang L, Shi Y M, Sun Y H, Lu G, Zhang Q, Chen X D, Zhang H 2012 *ACS Nano* **6** 74
- [26] Rostami H, Moghaddam A G, Asgari R 2013 *Phys. Rev. B* **88** 085440

- [27] Tahir M, Schwingenschlogl U 2014 *New J. Phys.* **16** 115003
- [28] Zhou L, Carbotte J P 2012 *Phys. Rev. B* **86** 205425
- [29] Kitagawa T, Oka T, Brataas A, Fu L, Demler E 2011 *Phys. Rev. B* **84** 235108
- [30] Kitagawa T, Broome M A, Fedrizzi A, Rudner M S, Berg E, Kassal I, Guzik A A, Demler E, White A G 2012 *Nat. Commun.* **3** 882
- [31] Tahir M, Manchon A, Sabeeh K, Schwingenschlogl U 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 162412
- [32] Sinitsyn N A, Hill J E, Min H, Sinova J, MacDonald A H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 106804
- [33] Dutta P, Maiti S K, Karmakar S N 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 044306
- [34] Cazalilla M A, Ochoa H, Guinea F 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 077201
- [35] Tahir M, Manchon A, Schwingenschlogl U 2014 *Phys. Rev. B* **90** 125438
- [36] Feng W X, Yao Y G, Zhu W G, Zhou J J, Yao W, Xiao D 2012 *Phys. Rev. B* **86** 165108
- [37] Missault N, Vasilopoulos P, Vargiamidis V, Peeters F M, van Duppen B 2015 *Phys. Rev. B* **92** 195423

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

Zhang Xin-Cheng Liao Wen-Hu[†] Zuo Min

(College of Physics, Mechanical and Electrical Engineering, Jishou University, Jishou 416000, China)

(Received 28 January 2018; revised manuscript received 5 March 2018)

Abstract

The new-type monolayer semiconductor material molybdenum disulfide (MoS₂) is direct band gap semiconductor with a similar geometrical structure to graphene, and as it owns superior physical features such as spin/valley Hall effect, it should be more excellent than graphene from the viewpoint of device design and applications. The manipulation of the spin and valley transport in MoS₂-based device has been an interesting subject in both experimental and theoretical researches. Experimentally, the photoninduced quantum spin and valley Hall effects may result in high on-off speed spin and/or valley switching based on MoS₂. Theoretically, the off-resonant electromagnetic field induced Floquet effective energy should modulate effectively the electronic structure, spin/valley Hall conductance as well as the spin/valley polarization of the MoS₂, through the virtual photon absorption and/or emission processes. Utilizing the low energy effective Hamilton model from the tight-binding approximation and Kubo linear response theorem, we theoretically investigate the electronic structure and spin/valley transport properties of the monolayer MoS₂ under the irradiation of the off-resonant circularly polarized light in the present work. The band gaps around the *K* and *K'* point of the Brillouin region for monolayer MoS₂ proves to increase linearly and decrease firstly and then increase, respectively with the increase of external off-resonant right-circularly polarized light induced effective coupling energy, and decrease firstly and then increase and increase linearly with the increase of left-circularly polarized light induced effective coupling energy, therefore, the interesting transition of semiconducting-semimetallic-semiconducting may be observable in monolayer MoS₂. Furthermore, the spin and valley Hall conductance of the monolayer MoS₂ for the case without off-resonant circularly polarized light are 0 and $2e^2/h$, respectively, and they will convert into $-2e^2/h$ and 0 when the absolute value of the off-resonant circularly polarized light induced effective coupling energy is in a range of 0.79–0.87 eV. Finally, the spin polarization for monolayer MoS₂ increases up to a largest value and changes from positive to negative and/or negative to positive at the vicinity of the effective coupling energy ± 0.79 eV of the off-resonant right/left circularly polarized light, while the valley polarization should increase firstly and then decrease with the off-resonant circularly polarized light, and goes up to 100% in the range of 0.79–0.87 eV of the absolute value for effective coupling energy. Therefore, the external off-resonant circularly polarized electromagnetic field should be an effective means in manipulating the electronic structure, spin/valley Hall conductance and spin/valley polarization of the monolayer MoS₂, the two-dimensional MoS₂ may be tuned into a brand bandgap material with excellent spin/valley and optoelectrical properties.

Keywords: MoS₂, off-resonant light, electronic structure, spin/valley Hall conductance

PACS: 71.10.Hf, 72.25.Dc, 73.22.-f, 73.50.-h

DOI: 10.7498/aps.67.20180213

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11664010, 11264013), the Hunan Provincial Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 2017JJ2217, 12JJ4003), the Scientific Research Fund of Hunan Provincial Education Department of China (Grant No. 14B148), and the Research Program of Jishou University, China (Grant Nos. JGY201763, Jdy16021).

† Corresponding author. E-mail: whliao2007@aliyun.com