

拉伸应变对单层二硫化钼光电特性的影响

刘凯龙 彭冬生

Effects of photoelectric properties of monolayer MoS₂ under tensile strain

Liu Kai-Long Peng Dong-Sheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 217101 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210816

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210816>

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

石墨烯封装单层二硫化钼的热稳定性研究

Thermal stability of MoS₂ encapsulated by graphene

物理学报. 2018, 67(22): 226501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181255>

基于单层二硫化钼的高品质因子、高品质因数的四波段完美吸收器

A four-band perfect absorber based on high quality factor and high figure of merit of monolayer molybdenum disulfide

物理学报. 2021, 70(12): 128101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202163>

二硫化钼/石墨烯异质结的界面结合作用及其对带边电位影响的理论研究

Interfacial cohesive interaction and band modulation of two-dimensional MoS₂/graphene heterostructure

物理学报. 2017, 66(8): 087101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.087101>

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>

等离子体谐振腔对二硫化钼的荧光增强效应

Fluorescence enhancement of monolayer MoS₂ in plasmonic resonator

物理学报. 2019, 68(23): 237801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191121>

分子动力学模拟研究孪晶界对单层二硫化钼拉伸行为的影响

Molecular dynamics simulations for tensile behaviors of mono-layer MoS₂ with twin boundary

物理学报. 2019, 68(21): 216201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182125>

拉伸应变对单层二硫化钼光电特性的影响*

刘凯龙 彭冬生†

(深圳大学物理与光电工程学院, 深圳 518000)

(2021年4月28日收到; 2021年6月14日收到修改稿)

单层二硫化钼是制作各种微纳元器件及柔性电子器件较为理想的材料. 然而在实践和应用中, 材料受到环境所导致的应变是一个无法避免的关键问题, 材料的电子结构也会随应变而发生改变. 本文基于第一性原理并结合湿法转移后的拉伸实验, 研究了拉伸应变对单层二硫化钼光电特性的影响. 结果表明: 1) 本征单层二硫化钼为直接带隙半导体, 禁带宽度为 1.68 eV; 吸收系数曲线最强峰位于 10.92 eV 附近, 最大吸收系数为 $1.66 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. 2) 开始施加拉应变 (1%) 时, 其能带结构从直接带隙转变为间接带隙; 随着应变的增大, 能带仍然保持间接带隙的特征, 且禁带宽度呈现线性下降的趋势; 当拉应变为 10% 时, 禁带宽度降为 0 eV. 吸收系数曲线随应变施加而发生红移. 3) 通过对湿法转移后的单层二硫化钼进行拉伸实验, 拉曼光谱中的面内模式 E_{2g}^1 和面外模式 A_{1g} 峰都会随拉伸而发生红移, 且两峰的峰值频率差保持在 18.6 cm^{-1} 左右; 在光致发光谱 1.83 eV 处观察到单层二硫化钼的 A 激子的强发射峰. 随着拉应变的变大, 峰值相对强度降低并且线性红移, 代表带隙的线性减小, 与理论计算结果相符.

关键词: 二硫化钼, 拉伸应变, 能带, 第一性原理

PACS: 71.15.Mb, 73.22.-f, 73.61.-r

DOI: 10.7498/aps.70.20210816

1 引言

随着近年来石墨烯研究热潮的兴起, 具有层间范德瓦耳斯力限制的原子级厚度的二维材料受到广泛关注. 因此以二硫化钼 (MoS_2) 为代表的具有天然带隙的二维材料在微纳电子学领域也开始崭露头角. 基于 MoS_2 独特的电学、光学、热学和力学特性, 在很多应用领域都是极具吸引力的材料^[1-6]. 与石墨烯类似, 单层二硫化钼是一种弹性力很强的材料, 目前从实验和理论层面研究了本征二硫化钼的各项基本力学特性, 表明其能满足柔性电子器件各种复杂的拉伸场景, 是制备柔性电子器件较为理想的衬底材料^[7-10]. 然而在实践和应用中, 材料受到环境所导致的应变是一个无法避免的关键问题, 材料的电子结构也会随应变而发生改变, 所以在实

际应用中必须深刻了解其应变机制, 探究应变对材料性能的影响具有非常重要的意义, 并能为单层 MoS_2 的柔性器件提供理论依据.

国内外若干研究单位相继开展了关于单层 MoS_2 性能受应变影响的研究工作. 例如, Liu 等^[10] 研究了单层 MoS_2 原子层中的应变和结构异质性, 并证明了单晶单层 MoS_2 中的不均匀应变和应变诱导的带隙工程. Pak 等^[11] 研究了单层 MoS_2 接触能垒的应变工程和光响应行为. Conley 等^[12] 研究了机械剥落的单层和双层 MoS_2 应变的带隙变化. Dadgar 等^[13] 研究了单层过渡金属二硫属元素化物的应变工程和拉曼光谱. 李明林等^[14] 研究了单层 MoS_2 性能随温度的变化趋势以及手性效应的影响. Kuc 等^[15] 研究了 MoS_2 层间相互作用对其能带结构的影响. 吴木生等^[16] 研究了 2.5% 拉伸范围内应变对单层 MoS_2 能带影响. Wu 等^[17] 研究了

* 深圳市基础研究项目 (批准号: JCYJ20180305124822272).

† 通信作者. E-mail: sbpengds@szu.edu.cn

晶粒尺寸对单层多晶 MoS_2 拉伸强度的影响. 由于单层 MoS_2 样品仅 0.65 nm 厚, 在制备和测试过程中存在诸多困难和挑战 [18–20], 因此以第一性原理计算为代表的纳米尺度计算模拟方法成为分析单层 MoS_2 材料结构和力学性能的重要手段 [21,22].

本文基于第一性原理计算得出了本征单层 MoS_2 的电子能带结构和吸收系数. 分析了拉应变和压应变的影响; 并结合实验和表征研究了拉伸对单层 MoS_2 光学特性的影响.

2 计算方法及实验

2.1 计算方法

本文计算采用基于密度泛函理论的第一性原理方法 [23], 使用 VASP (Vienna *ab-initio* simulation package) 程序包完成 [24], 选择广义梯度近似平面波赝势方法, 结合 Perdew-Burke-Ernzerhof 交换关联势, 原子实和价电子之间的相互作用通过映射缀加波势来描述. VASP 软件采用超原胞模型, 在实际计算中, 将超原胞划分为足够细的网格点, 在每个网格点上给定一组初始波函数, 并计算出电荷密度 $\rho(r)$ 和交换关联势, 然后根据本征方程求出一组波函数和本征能量. 根据求得的波函数, 再次求出下一组波函数和本征能量, 一直迭代直到两次求出的本征能量之差小于某一预设值 (自洽), 则得到体系的总能量. 计算过程中, 把 Mo 原子的 4d 电子作为价电子处理, 计算时平面波截断能量为 550 eV, 采取 $9 \times 9 \times 1$ 的倒空间 k 点网格, 这些参数使得总能收敛. 使用共轭梯度法优化 MoS_2 结构, 直到每个原子间的受力收敛精度不超过 0.01 eV/Å ($1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$). 为模拟单层 MoS_2 , 把单层 MoS_2 放置在超原胞结构中, 为消除层间相互作用引起的干扰, 真空层大小取为 2 nm.

单层 MoS_2 是由一层 Mo 原子层和上下两层 S 原子堆积而成, 单层 MoS_2 的结构图如图 1 所示. 蓝色虚线平行四边形表示 MoS_2 的原胞, 每个原胞中含有 1 个 Mo 原子和 2 个 S 原子, 无应变时 2 个硫原子层的垂直距离为 d_0 .

本文研究了在 0%—10% 范围的平拉伸应变对单层 MoS_2 的物理性质的影响, 由于在水平方向的应变会引起平面内晶格常数的变化, 在每个应变之下, 都优化了平面内的晶格常数, 采用的方法是计算一系列的平面内晶格常数, 得到该应变之下总能

与平面内晶格常数的关系, 总能最小值所对应的平面内晶格常数, 即为该水平应变之下平面内的晶格常数. 体系在平面内晶格常数 a_0 在 3.183 Å 时的总能最低. 此时, 单层 MoS_2 中的 S—Mo 键长为 2.413 Å, 两个硫原子层的垂直间距 h_0 为 3.127 Å, 和 Ramakrishna 等 [25] 的计算结果比较接近.

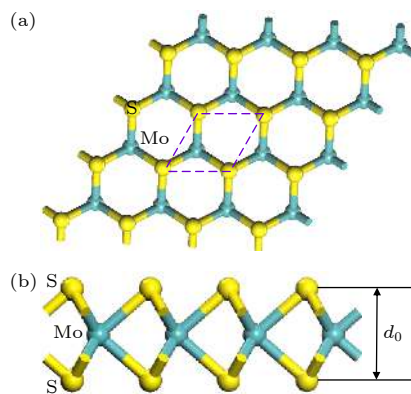


图 1 单层 MoS_2 晶体结构示意图 (a) 顶视图; (b) 侧视图
Fig. 1. Structure diagram of monolayer MoS_2 : (a) Top view; (b) side view.

2.2 实验流程

实验所用的单层 MoS_2 连续薄膜通过化学气相沉积法生长在具有 300 nm 厚的 SiO_2 的 Si 衬底上. 将单层 MoS_2 转移到柔性聚二甲基硅氧烷 (PDMS) 衬底上并测试光学性能. 柔性 PDMS 制备流程如下: 1) 制作样品模板, 倒入质量比为 10:1 的 PDMS 原液:固化剂, 放置在 100 °C 加热台上加热 0.5 h; 2) 加脱模剂, 继续热熏 1 h; 3) 通过超声波、真空脱泡机进行脱泡处理; 4) 放置在 80 °C 干燥箱中固化 6 h, 冷却完毕, 取样.

采用湿法转移的方法将 MoS_2 膜转移到柔性 PDMS 衬底上, 利用聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA) 作为支撑层. 单层 MoS_2 的转移流程如图 2 所示. 1) 在 MoS_2 膜上旋涂一层 40 mg/mL 的 PMMA, 然后放置在加热台 (100 °C) 上加热 30 min 固化 PMMA; 2) 用 2 mol/L 的 NaOH 溶液腐蚀 SiO_2 层直到薄膜分离为止. 将漂浮的 PMMA/ MoS_2 膜转移到 DI 水中清洗残留的 NaOH 溶液; 3) 取合适大小的 PDMS 衬底, 用丙酮、乙醇进行清洗; 4) 通过等离子体清洗机进行 PDMS 衬底表面亲水性处理, 用 PDMS 衬底把漂浮的 MoS_2 薄膜捞出, 放入手套箱倾斜放置自然晾干 4 h 以上, 再放入 100 °C 的干燥箱中 1 h 蒸发残留水分, 改善 MoS_2 和衬底

的结合; 5) 分多次放入丙酮溶液浸泡 2 h 以除去 PMMA, 然后用乙醇、去离子水清洗, 最后用氮气吹干.

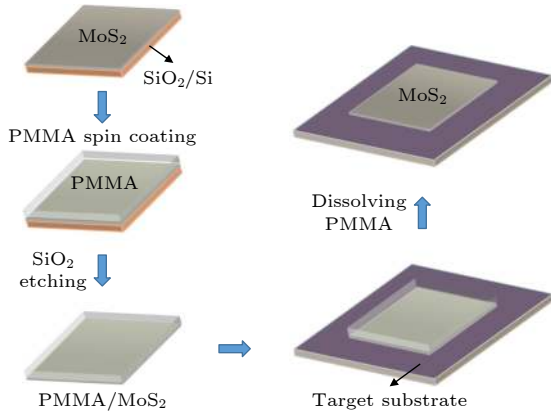


图 2 单层 MoS₂ 湿法转移流程图

Fig. 2. Flow chart of wet transfer of monolayer MoS₂.

实验采用的单层 MoS₂ 膜由深圳六碳科技公司通过化学气相沉积法进行生长. 转移过后的薄膜通过 Renishaw 公司生产的、型号 InVia 的拉曼光谱仪进行拉曼光谱 (Raman spectra) 和光致发光光谱 (photoluminescence spectroscopy, PL) 的测量, 使用 532 nm DPSS 激光进行激发.

3 结果及分析

3.1 计算结果及分析

图 3(a) 是计算得到的本征单层 MoS₂ 的能带结构 (以费米能级为 0 eV), 可以看出, 单层 MoS₂ 为直接带隙, 价带最高点和导带最低点均为 *K* 点, 禁带宽度为 1.68 eV, 略低于实验值 1.73 eV^[26]. 因为在使用密度泛函方法求解方程的过程中, 没有考

虑激发态, 这是采用密度泛函理论计算能带的常见现象, 并不会影响对能带和电子结构的分析.

在能带计算的基础上, 对单层 MoS₂ 的光学性质进行了计算. 介电函数 $\epsilon(\omega)$ 能够反映出固体的光谱信息, $\epsilon(\omega)$ 是 1 个复数, 分为实部和虚部两部分^[27]:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega). \quad (1)$$

介电函数的虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 可以由能带进行计算得到^[27]:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{\Omega} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \sum_{c,v,k} 2w_k \epsilon(\epsilon_{ck} - \epsilon_{vk} - \omega) \times \langle u_{ck+eq} | u_{vk} \rangle \langle u_{ck+eq} | u_{vk} \rangle^*. \quad (2)$$

其中, Ω 代表原胞的体积, q 为入射波的布洛赫矢量, w_k 是 $k = 1$ 时的权重, σ 为狄拉克函数, ϵ_{ck} 和 ϵ_{vk} 分别为导带、价带的介电函数值, u_{ck+eq} 和 u_{vk} 代表赝波函数原胞的导带、价带部分, 矢量 e 表示为 3 个笛卡儿方向的单位向量.

对虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 进行 Kramer-Kronig 变换能得到介电函数的实部 $\epsilon_1(\omega)$ ^[27]:

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\epsilon_2(\bar{\omega}) \bar{\omega}}{\bar{\omega}^2 - \omega^2} d\bar{\omega}. \quad (3)$$

其中, P 表示主值, $\bar{\omega}$ 为 ω 的导数.

计算得到的本征单层 MoS₂ 的介电函数的虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 如图 3(b) 所示. 最大峰值出现在 2.7 eV 处, 是由价带顶到导带底的跃迁所决定的, 代表单层 MoS₂ 在入射光频率为 2.7 eV 左右时达到最大吸收峰值. 对介电函数的实部 $\epsilon_1(\omega)$ 与虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 进行计算可以得到固体的吸收系数 $\alpha(\omega)$:

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2}\omega \sqrt{\sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} - \epsilon_1(\omega)}. \quad (4)$$

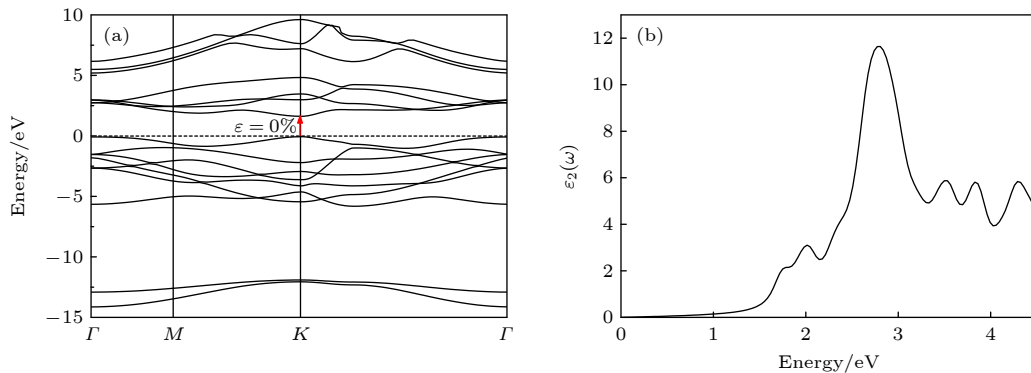


图 3 本征 MoS₂ 的 (a) 能带结构图和 (b) 介电函数虚部

Fig. 3. (a) Energy band structure of intrinsic MoS₂; (b) imaginary part of the intrinsic monolayer MoS₂ dielectric function.

图 4 是不同拉应力下计算得到的单层 MoS₂ 能带结构图. 从图 4 可以看出, 当开始施加拉应变 (1.0%) 时, 价带的最高点便发生了转移, 从布里渊区的 K 点转移到 Γ 点, 但是导带的最低点依旧保持在 K 点处, 因此单层 MoS₂ 的能带从直接带隙转变成了间接带隙. 随着拉伸的增大, 其禁带宽度逐渐变小, 并且一直保持为间接带隙的特点. 从未施加应变到施加 5.0% 的应变的过程中, 单层 MoS₂ 的禁带宽度从 1.68 eV 减小到 0.912 eV. 当拉伸应

变为 10% 时, 禁带宽度降为 0 eV, 此时单层 MoS₂ 由半导体转变为金属.

图 5(a) 给出了价带最高点 K 和次高点 Γ 点随应力变化的能量值. 当拉伸不断施加时, 价带次高点 Γ 点的能量值仅从 -0.085 eV 缓慢上升到 -0.081 eV; 而 K 点的绝对能量由 -0.066 eV 下降到 -0.645 eV. 可以得知转变为间接带隙的原因: 价带位置处的 K 点和 Γ 点的能量变化对拉伸的敏感程度不同. 其根本原因在于拉伸应变改变了原子

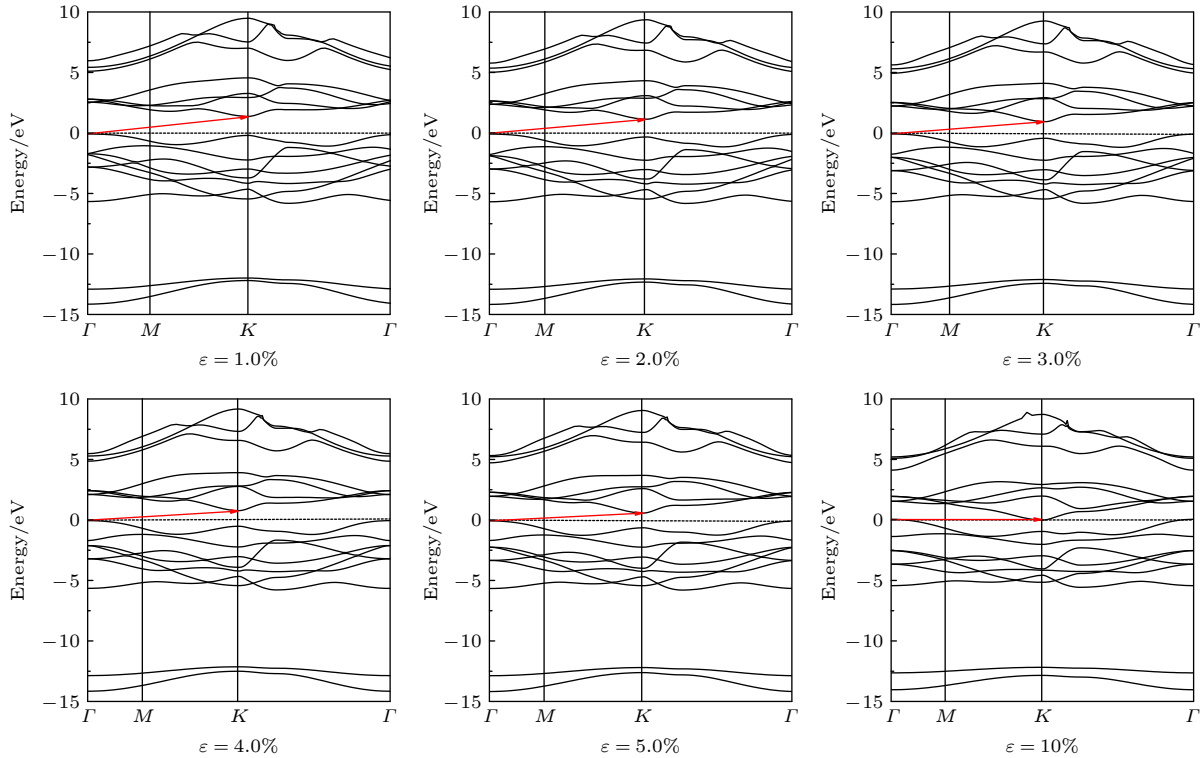


图 4 不同拉应变下 (1.0%—10%) 单层 MoS₂ 的能带结构图

Fig. 4. Band structure diagram of monolayer molybdenum disulfide under different tensile strains (1.0%–10%).

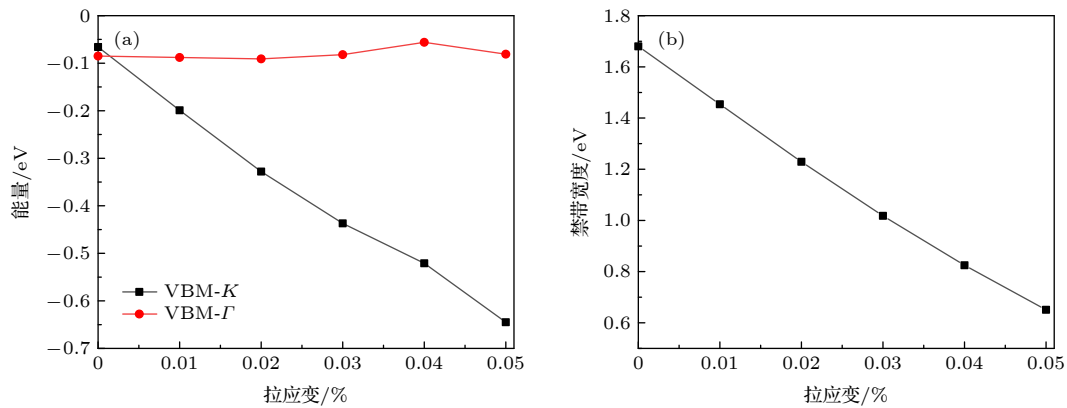


图 5 (a) 最高价带 (VBM) 上 Γ 点与 K 点的能量随应力增大的变化情况; (b) 单层 MoS₂ 的禁带宽度随拉应变的变化曲线

Fig. 5. (a) Variation of energy of point Γ and point K on the maximum price band (VBM) with the increase of stress; (b) variation curve of band gap width of monolayer MoS₂ with tensile strain.

位置的弛豫, 间接影响原子间的成键性质和成键强度, 能带结构随之发生改变^[28]. 单层 MoS₂ 的禁带宽度随拉应变的变化关系如图 5(b) 所示, 数据显示禁带宽度随拉应变的增大而线性减小.

图 6 为单层 MoS₂ 在本征状态和拉应变 5% 下的总态密度 (DOS) 和部分态密度 (PDOS) 图, 其中黑色为 DOS 图, 彩色为 PDOS 图. 价带的最高点主要有两种原子的轨道贡献, 分别为钼原子的 d 轨道和硫原子的 p 轨道. 在能级 -6 eV 到 -1 eV 的范围内, Mo-d 轨道和 S-p 轨道态密度形状相似, 表明两者间共用电子程度高, 对应于 Mo-d 轨道和 S-p 轨道间形成的类似于 σ 键的相互作用. 在 -1 eV 到 Fermi 能级范围内, Mo-d 轨道和 S-p 轨道间形成强度较弱的类 π 键的相互作用. 这种作用对应应变极为敏感, 导致施加应变后能带结构发生显著变化^[16,29].

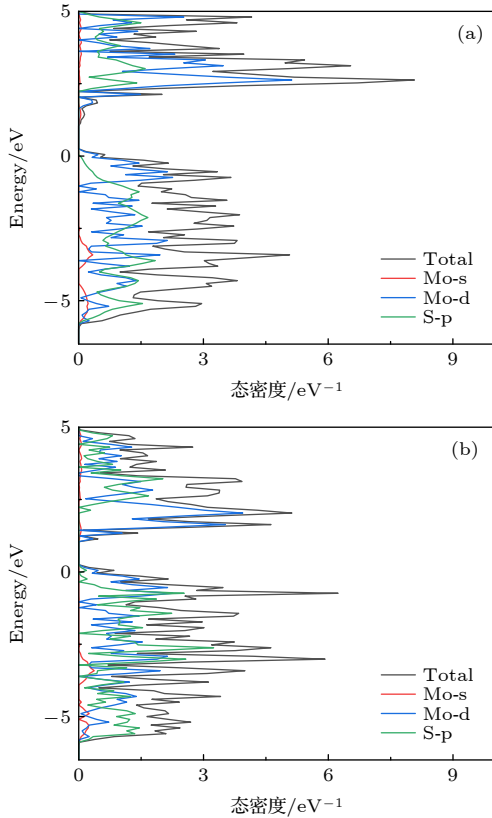


图 6 单层 MoS₂ 在 (a) 无应变和 (b) 拉应变 5% 下的态密度图
Fig. 6. Electron density of states of monolayer MoS₂ for (a) zero strain and (b) 5% tensile strain.

图 7 给出了计算得到的单层 MoS₂ 在不同拉应变下的吸收系数, 由本征吸收系数曲线 (0.0%) 可见, 长波吸收边对应的光子能量约为 1.5 eV, 对应于导带和价带之间的电子直接跃迁能量, 其中最

强峰位于 10.92 eV 附近, 最大吸收系数为 $1.66 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$, 吸收系数在 8.478 eV 处有 1 个低谷. $\alpha(\omega)$ 的第 1 个峰值在 2.8 eV 附近, 处于可见光中紫光的能量附近, 这解释了 MoS₂ 晶体呈现深紫色的原因. 单层 MoS₂ 拉应变的吸收系数的结果都与本征 MoS₂ 吸收系数图像在趋势上非常接近, 拉应变吸收系数曲线随应变增大而整体红移.

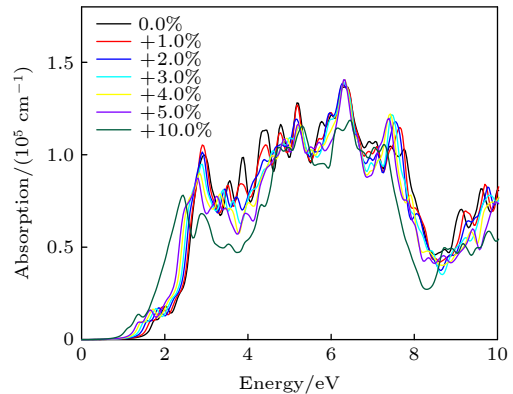


图 7 不同拉应变下的单层 MoS₂ 吸收系数图

Fig. 7. Monolayer MoS₂ absorption coefficients under different tensile and compressive strains.

3.2 实验结果及分析

图 8(a) 和图 8(b) 分别为通过湿法转移到 Si 衬底的单层 MoS₂ 的光学显微镜 (optical microscope, OM) 图像和 PL 光谱图, 图 8(c) 和图 8(d) 分别为转移到 PDMS 衬底上的单层 MoS₂ 的 OM 图像和实物图. 在 PL 光谱的 1.83 eV 处观察到单层 MoS₂ 的 A 激子的强发射峰, 这表明转移后的单层 MoS₂ 膜仍然是高质量的. 单层 MoS₂ 的 A 激子的 PL 峰可归因于 1.84 eV 的负三极峰和 1.88 eV 的中性激子峰的共同作用, PL 光谱中负三极峰的存在能表明 1L MoS₂ 具有电 n 型特征^[30].

对转移到柔性 PDMS 上的单层 MoS₂ 通过拉曼光谱仪 (使用 532 nm DPSS 激光进行激发) 下进行不同拉伸应变下的测试, 所施加的应变近似为 $\varepsilon = \tau/R$, 其中 2τ 是这项工作中使用的 PDMS 衬底的厚度. 图 9 给出了单层 MoS₂/PDMS 的拉曼光谱、PL 光谱及相应峰位在不同拉伸应变下的变化趋势图. 随着拉应变的增大, 拉曼光谱图中面内模式 E_{2g}^1 和面外模式 A_{1g} 峰之间的峰值频率差始终保持在 18.6 cm^{-1} 左右, 两峰都会发生红移, 是由于拉伸应变引起的声子软化^[41]. PL 谱峰值强度随着拉应变的增大而降低, PL 峰位红移, 代表

光学带隙的减小, 观察到的 PL 峰位置的移动趋势以及所施加的应变的光谱强度降低归因于应变引

起的带隙和 PL 效率的下降, 这与理论预测一致, 峰值红移近似线性改变.

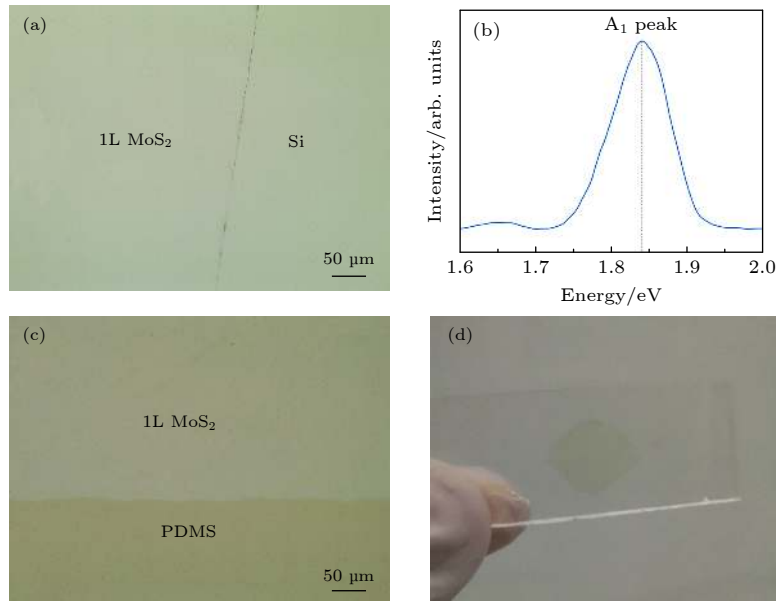


图 8 单层 MoS₂ 连续膜通过湿法转移后, (a) 转移到 Si 衬底上的 OM 图像, (b) 转移到 Si 衬底上的 PL 光谱, (c) 转移到 PDMS 衬底上的 OM 图像, (d) 转移到 PDMS 衬底上的实物图

Fig. 8. (a) OM images transferred to Si substrates, (b) PL spectra transferred to Si substrates, (c) OM images transferred to PDMS substrates, (d) real figures transferred to PDMS substrates when monolayer MoS₂ continuous film is transferred by wet method.

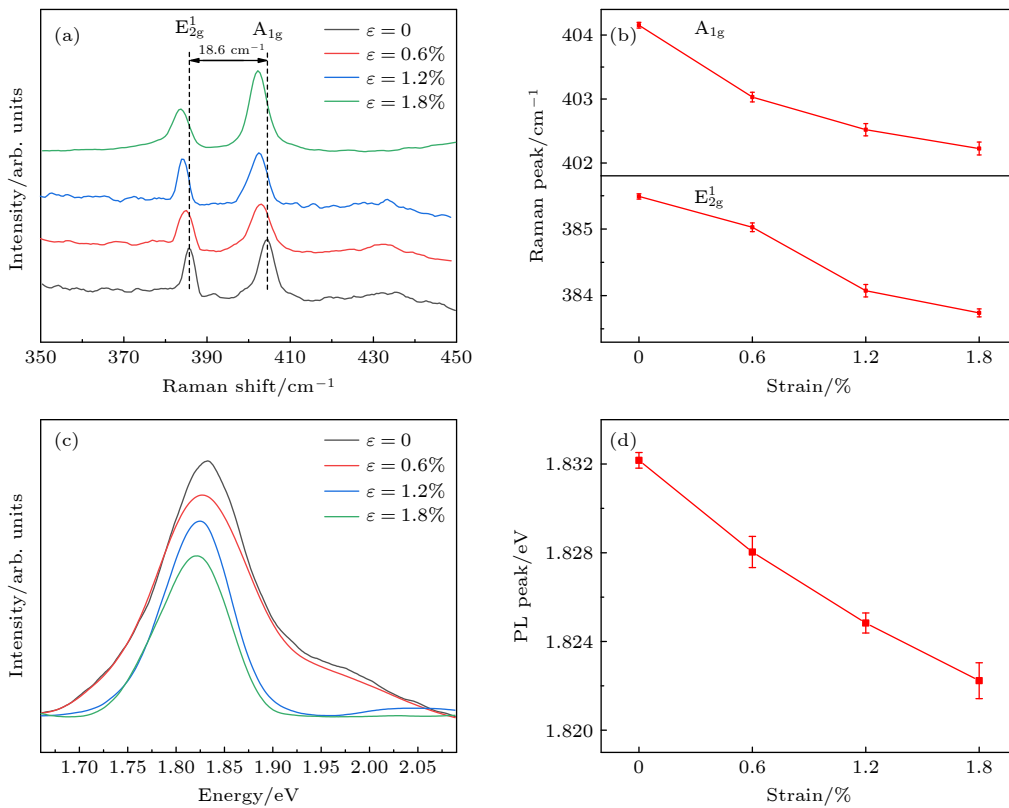


图 9 对单层 MoS₂/PDMS 进行 0%—1.8% 拉伸应变时的 (a) 拉曼光谱, (b) 拉曼峰的改变, (c) PL 光谱, (d) PL 峰的改变

Fig. 9. (a) Raman spectroscopy, (b) change of Raman peak position, (c) PL spectroscopy, (d) change of PL peak position when monolayer MoS₂/PDMS is stretched by 0%—1.8%.

4 结 论

本文基于第一性原理并结合湿法转移后的拉伸实验,研究了拉伸应变对单层 MoS₂ 光电特性的影响. 主要得出以下结论: 1) 计算得出本征单层 MoS₂ 为直接带隙半导体, 禁带宽度为 1.68 eV. 由吸收系数曲线可见, 长波吸收边对应的光子能量约为 1.5 eV, 最强峰位于 10.92 eV 附近, 最大吸收系数为 $1.66 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. 从未施加应变到施加 5.0% 的应变的过程中, 单层 MoS₂ 由直接带隙转变为间接带隙, 禁带宽度从 1.68 eV 随应变增大而线性减小到 0.912 eV. 转变为间接带隙的原因是价带位置处的 *K* 点和 *Γ* 点的能量变化对拉伸的敏感程度不同, 在 -1 eV 到 Fermi 能级范围内, Mo-d 轨道和 S-p 轨道间形成强度较弱的类 π 键的相互作用. 这种作用对应应变极为敏感. 当拉应变为 10% 时, 禁带宽度降为 0 eV, 此时, 单层 MoS₂ 由半导体转变为金属性质. 吸收系数曲线随拉应变的增大而整体红移. 2) 结合湿法转移工艺将单层 MoS₂ 连续膜转移到了柔性 PDMS 衬底上并进行拉伸测试. 在拉曼光谱中, 面内模式 E_{2g}¹ 和面外模式 A_{1g} 峰都会随拉伸发生红移, 两峰之间的峰值频率差始终在 18.6 cm⁻¹ 附近. 在 PL 光谱的 1.83 eV 处观察到单层 MoS₂ 的 A 激子的强发射峰, 这表明转移后的单层 MoS₂ 膜仍然是高质量的. 随着拉应变的增大, PL 峰的峰值强度降低且峰位线性红移, 代表带隙的线性减小, 实验结果与理论计算结果相符.

参考文献

- [1] Lin J, Zhong J, Zhong S, Li H, Zhang H, Chen W 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 063109
- [2] Yin Z, Zhang X, Cai Y, Chen J, Wong J I, Tay Y Y 2014 *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** 12560
- [3] Que H F, Jiang H N, Wang X G, Zhai P B, Meng L J, Zhang P, Gong Y J 2021 *Acta Phys-Chim Sin.* **37** 2010051
- [4] Kumar S, Sharma A, Tomar M, Gupta V 2021 *Mater. Sci. Eng. B* **266** 11
- [5] Tetsuka H, Nagoya A, Tamura S I 2016 *Nanoscale* **8** 19677
- [6] Singh E, Kim K S, Yeom G Y, Nalwa H S 2017 *RSC Advan.* **7** 28234
- [7] Pak S, Jang A R, Lee J, Hong J, Giraud P, Lee S 2019 *Nanoscale* **11** 4726
- [8] Liu Y, Weiss N O, Duan X D, Cheng H C, Huang Y, Duan X F 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 17
- [9] Wu W, Wang L, Yu R, Liu Y, Wei S H, Hone J 2016 *Advan. Mater.* **28** 8463
- [10] Liu Z, Amani M, Najmaei S, Xu Q, Zou X, Zhou W 2014 *Nat. Commun.* **5** 5246
- [11] Pak S, Lee J, Jang A, Kim S, Park K, Sohn J I, Cha S 2020 *Adv. Funct. Mater.* **30** 2002023
- [12] Conley H J, Wang B, Ziegler J I, Haglund R F, Pantelides S T, Bolotin K I 2013 *Nano Lett.* **13** 3626
- [13] Dadgar A M, Scullion D, Kang K, Esposito D, Yang E H, Herman I P 2018 *Chem. Mat.* **30** 5148
- [14] Li M L, Wan Y L, Hu J Y, Wang W D 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 176201 (in Chinese) [李明林, 万亚玲, 胡建玥, 王卫东 2016 物理学报 **65** 176201]
- [15] Kuc A, Zibouch N E, Heine T 2011 *Phys. Rev. B* **83** 245213
- [16] Wu M S, Xu B, Liu G, Ouyang C Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 227102 (in Chinese) [吴木生, 徐波, 刘刚, 欧阳楚英 2012 物理学报 **61** 227102]
- [17] Wu J Y, Cao P Q, Zhang Z S, Ning F L, Zheng S S, He J Y, Zhang Z L 2018 *Nano Lett.* **18** 1543
- [18] Zhang R, Koutsos V, Cheung R 2016 *Appl. Phys. Lett.* **108** 042104
- [19] Hao S, Yang B, Gao Y 2017 *Appl. Phys. Lett.* **110** 153105
- [20] Yang Y, Li X, Wen M, Hacopian E, Chen W, Gong Y, Zhang J, Li B, Zhou W, Ajayan P M, Chen Q, Zhu T, Lou J 2017 *Adv. Mater.* **29** 1604201
- [21] Yun W S, Han S W, Hong S C, Kim I G, Lee J D 2012 *Phys. Rev. B* **85** 033305
- [22] Hu T, Li R, Dong J M 2013 *J. Chem. Phys.* **139** 174702
- [23] Xu B, Pan B C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6526 (in Chinese) [徐波, 潘必才 2008 物理学报 **57** 6526]
- [24] Kresse G, Furthmuller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [25] Ramakrishna M, Gomathi A, Manna A K 2010 *Angew. Chem. Int. Ed.* **122** 4153
- [26] Kam K K, Parkinson B A 1982 *J. Phys. Chem.* **86** 463
- [27] Gajdos M, Hummer K, Kresse G 2006 *Phys. Rev. B* **73** 045112
- [28] Kadantsev E S, Hawrylak P 2012 *Solid State Commun.* **152** 909
- [29] Wang W D, Yang C G, Bai L W, Li M L, Li W B 2018 *Nanomaterials* **8** 74
- [30] Mak K F, He K, Lee C, Lee G H, Hone J, Heinz T F 2013 *Nat. Mater.* **12** 207

Effects of photoelectric properties of monolayer MoS₂ under tensile strain^{*}

Liu Kai-Long Peng Dong-Sheng[†]

(School of Physics and Optoelectronic Engineering, Shenzhen University, Shenzhen 518000, China)

(Received 28 April 2021; revised manuscript received 14 June 2021)

Abstract

Monolayer molybdenum disulfide is an ideal material for making various micro/nano components and flexible electronic devices. However, the strain of material caused by the environment is a key problem that cannot be avoided in practical applications, and the electronic structure of material will also change with the strain. In this paper, the effect of tensile strain on the photoelectric properties of monolayer MoS₂ is studied based on first principles and tensile tests after wet transfer. The results are obtained as follows. 1) Intrinsic monolayer MoS₂ is a direct bandgap semiconductor with a band gap of 1.68 eV, the highest peak of the absorption coefficient curve is nearly 10.92 eV, and a maximum absorption coefficient is $1.66 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. 2) A small tensile strain (1%) will result in the transition from direct to indirect gap for monolayer MoS₂. With the increase of strain, the feature of the indirect gap can be preserved but the gap decreases linearly. The gap will decrease to 0 eV when the tensile strain is 10%, and the absorption coefficient curve is red-shifted as a whole with strain. 3) The in-plane mode peak and the out-of-plane mode A_{1g} peak in Raman spectra are re-dshifted with stretching by tensile test of wet-transferred monolayer MoS₂, and the difference in peak frequency between the two peaks is maintained at about 18.6 cm^{-1} . The strong emission peak of an exciton of monolayer MoS₂ is observed at 1.83 eV of the photoluminescence spectrum. With the increase of tensile strain, the relative strength of the peak decreases and is linearly re-dshifted, which means that the band gap decreases linearly. It is consistent with the theoretical calculation result.

Keywords: molybdenum disulfide, tensile strain, energy bands, first principles

PACS: 71.15.Mb, 73.22.-f, 73.61.-r

DOI: [10.7498/aps.70.20210816](https://doi.org/10.7498/aps.70.20210816)

^{*} Project supported by the Shenzhen Basic Research Foundation, China (Grant No. JCYJ20180305124822272).

[†] Corresponding author. E-mail: sbpengds@szu.edu.cn