

层数相关黑磷双光子吸收的理论研究

罗雪琴¹, 冯小波^{1,2,3*}¹ 云南师范大学物理与电子信息学院, 云南 昆明 650500;² 云南师范大学云南省光电信息技术重点实验室, 云南 昆明 650500;³ 云南师范大学可再生能源材料先进技术与制备教育部重点实验室, 云南 昆明 650500

摘要 原子层数是对黑磷物理性质宽波段可调谐的重要参量。基于 5 跳参数连续近似模型, 从理论上研究了单层、双层和三层黑磷的双光子吸收系数对原子层数以及入射光偏振方向的依赖性。计算结果表明: 黑磷的双光子吸收系数在扶手型方向上比锯齿型方向上大 10 个数量级, 且双光子吸收系数随着层数的增加而增大, 并且吸收峰发生红移; 双光子吸收系数随入射线偏振光的偏振角度按余弦函数呈周期性变化, 当入射光偏振方向沿扶手型方向时双光子吸收系数最大, 随着入射角度的增大, 吸收系数减小, 直至偏振方向与锯齿型方向一致时达到最小。上述研究为将黑磷应用于光电器件提供了一定的理论指导。

关键词 非线性光学; 双光子吸收; 黑磷; 原子层数; 偏振方向

中图分类号 O437

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202242.0419001

Theoretical Study on Layer-Dependent Two Photon Absorption in Black Phosphorus

Luo Xueqin¹, Feng Xiaobo^{1,2,3*}¹ School of Physics and Electronic Information, Yunnan Normal University, Kunming, Yunnan 650500, China;² Yunnan Key Laboratory of Opto-Electronic Information Technology, Yunnan Normal University, Kunming, Yunnan 650500, China;³ Key Laboratory of Advanced Technique & Preparation for Renewable Energy Materials, Ministry of Education, Yunnan Normal University, Kunming, Yunnan 650500, China

Abstract The number of atomic layers is an important parameter for wide band tunability of physical properties of black phosphorus. We theoretically investigate the two photon absorption coefficient in monolayer, bilayer, and trilayer black phosphorus and its dependence on the atomic layer number and polarization direction of the incident light based on the 5-hopping parameter continuous approximate model. The results show that the order of magnitude of the two-photon absorption coefficient of black phosphorus in armchair direction is 10 orders of magnitude larger than that in zigzag direction. The two-photon absorption coefficient of black phosphorus increases with the increase of the number of layers and the absorption peak has a red shift. Moreover, the two-photon absorption coefficient changes periodically with the polarization angle of the incident light as a cosine function. And the two-photon absorption coefficients of black phosphorus are the maximum when the polarization direction of the incident light is along the armchair direction, and the absorption coefficients decrease with the increase of the incidence angle. When the polarization direction is consistent with the zigzag direction, the absorption coefficient is smallest. This study provides a reliable theoretical guidance for the use of black phosphorus in photoelectric devices.

Key words nonlinear optics; two photon absorption; black phosphorus; atom layer number; polarization direction

收稿日期: 2021-08-02; 修回日期: 2021-08-20; 录用日期: 2021-08-27

基金项目: 国家自然科学基金(11764047)、云南省万人计划“青年拔尖人才”(YNWR-QNBJ-2018-053)

通信作者: *fengxiaobo1220@gmail.com

1 引言

自从 2014 年研究人员通过胶带剥离获得单层和少层黑磷以来,他们对黑磷及其相关低维纳米材料的研究进入了热潮^[1-2]。黑磷作为磷元素最稳定的同素异形体,呈现出褶皱蜂窝状结构,是一种典型的直接带隙半导体材料。黑磷除了具有高的电子迁移率、合适的开关比、生物相容性好等特点以外,其最大的优势是可以通过原子层数对禁带宽度在 0.3~2 eV 之间调节,因而黑磷在可见光到红外波段有较好的光学响应,填补了零带隙的石墨烯和较大带隙的过渡金属硫化物之间的空白^[3-5]。另外,黑磷的褶皱结构导致其具有物理特性的各向异性^[6-8],因此黑磷在场效应晶体管^[9]、太阳能电池^[10]、饱和吸收器^[11]和光电探测器^[12]等光电器件方面具有广阔的应用前景。而光学吸收又是上述应用的有效途径之一。双光子吸收和单光子吸收相比,具有激发波长长、穿透深度深、空间分辨率高等优点^[13],因此进一步研究黑磷材料的双光子吸收性质对黑磷相关光电子器件的设计和优化起着重要的作用。

到目前为止,无论在实验上还是在理论上,研究人员对黑磷非线性光学性质的研究都已取得了一系列的成果。Zheng 等^[14-17]利用 Z 扫描技术并通过实验测量了黑磷相关纳米材料的非线性光学系数;Xu 等^[18]则采用 Z 扫描和泵浦-探测系统测量了黑磷纳米片尺寸相关的非线性吸收系数、非线性折射率以及超快动力学特征;Li 等^[19]从实验上揭示了黑磷非线性光学吸收系数对原子层数和入射光偏振方向的依赖性。理论方面,Margulis 等^[20]报道了采用频率为 ω 且垂直入射的线偏振相干激光激发单层黑磷

时的双光子吸收系数的计算模型。本课题组一方面理论研究了扶手型边界黑磷纳米带的双光子吸收谱,发现其在可见光区域具有比传统半导体量子点大得多的双光子吸收系数^[21],另一方面还研究了通过外电场引起的 Rashba 自旋轨道耦合效应对单层黑磷双光子吸收的增强作用^[22]。但目前研究人员对层数对黑磷非线性光学吸收性质调控的理论研究并不多见,而原子层数恰是实现其物理性质宽波段可调谐的重要参量。

为揭示原子层数对黑磷非线性光学吸收性质的调控规律,本文以单层、双层、三层黑磷材料为研究对象,从连续近似模型出发,并基于二阶微扰理论下双光子吸收的电子跃迁速率,计算模拟了不同层数和入射光偏振角度下黑磷的双光子吸收谱,分析了层数和入射光偏振方向对双光子吸收性质的影响。研究表明,黑磷的双光子吸收系数随着层数的增加而增大,并伴随着吸收峰的红移。在同一波长下,吸收系数与入射光偏振角度按余弦函数呈现周期性变化。在入射光偏振方向与扶手型方向平行时吸收系数最大,随着偏振角度的增大吸收系数减小,直至偏振方向与锯齿型方向一致后达到最小,此时的吸收系数比平行扶手型方向小接近 10 个数量级。上述研究结果对基于黑磷的光电器件的制作和应用有着指导意义,并且为检测黑磷厚度提供了一种新的思路。

2 理论模型与计算

少层黑磷的原子结构如图 1 所示,A 和 B(C 和 D)表示在底部(顶部)的子晶格。在两个相互垂直的方向,磷原子会排列成扶手型和锯齿型两种形式。

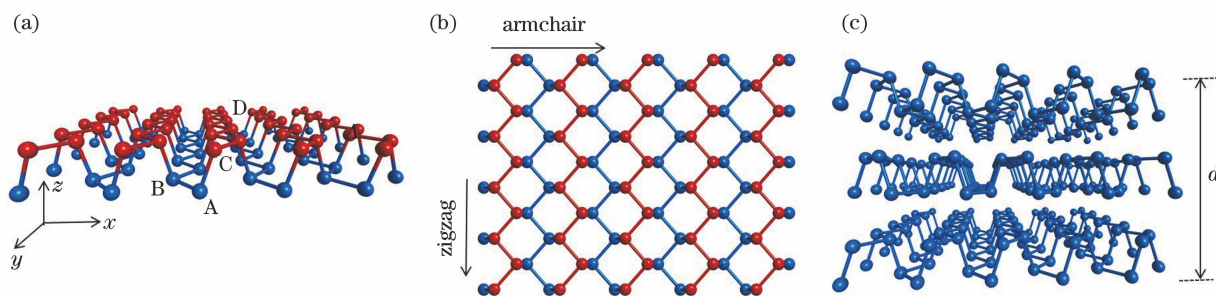


图 1 黑磷的晶体结构图。(a)单层黑磷侧视图;(b)单层黑磷俯视图;(c)三层黑磷侧视图

Fig. 1 Crystal structure diagram of black phosphorus. (a) Side view of monolayer black phosphorus; (b) top view of monolayer black phosphorus; (c) side view of trilayer black phosphorus

类似于单层黑磷的情况,基于 5 跳层内跃迁参数的连续近似哈密顿量,本文将 N 层黑磷在费米面

附近的哈密顿量描述为^[23]

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_n & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_n & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{H}_n \end{pmatrix}_{N \times N}, \quad (1)$$

式中： \mathbf{H}_n 为 N 层黑磷的低能量哈密顿量 ($n = 1,$

$2, \dots, N$), 在长波极限下 N 层黑磷与单层黑磷具有相同的结构, 只是各矩阵元的系数值不同。由于层间的耦合比层内的耦合弱得多, 因此多层系统可以被看作是受层间耦合扰动的多个单层的叠加^[24]。将受层间扰动的单层黑磷哈密顿量表示为

$$\mathbf{H}_n = \begin{pmatrix} u_0^{(n)} + \eta_x^{(n)} k_x^2 + \eta_y^{(n)} k_y^2 & \delta^{(n)} + \gamma_x^{(n)} k_x^2 + \gamma_y^{(n)} k_y^2 + i\chi^{(n)} k_x \\ \delta^{(n)} + \gamma_x^{(n)} k_x^2 + \gamma_y^{(n)} k_y^2 + i\chi^{(n)} k_x & u_0^{(n)} + \eta_x^{(n)} k_x^2 + \eta_y^{(n)} k_y^2 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

式中： k_j ($j = x, y$) 为 x, y 方向的波数； $u_0^{(n)} = u_0 + \lambda_n \delta_{AD'}$, $u_0 = \delta_{AD}$, $\lambda_n = \cos[n\pi/(N+1)]$ ； $\eta_x^{(n)} = \eta_x + \lambda_n \eta_{AD'}$, $\eta_x = \eta_{AD}$ ； $\eta_y^{(n)} = \eta_y + \lambda_n \eta_{AD'}$, $\eta_y = \eta_{AD}$ ； $\delta^{(n)} = \delta + \lambda_n \delta_{AC'}$, $\delta = \delta_{AB} + \delta_{AC}$ ； $\gamma_x^{(n)} = \gamma_x + \lambda_n \gamma_{AC'}$, $\gamma_x = \gamma_{AB} + \gamma_{AC}$ ； $\gamma_y^{(n)} = \gamma_y + \lambda_n \gamma_{AC'}$, $\gamma_y = \gamma_{AB} + \gamma_{AC}$ ； $\chi^{(n)} = \chi + \lambda_n \chi_{AC'}$, $\chi = \chi_{AB} + \chi_{AC}$ 。上述表达式中的各个物

理量为用紧束缚模型采用 5 跳连续近似将黑磷哈密顿量展开时的结构参数因子^[23], 相关参数的具体数值见表 1。其中 $\lambda_n = \cos[n\pi/(N+1)]$ 是根据少层黑磷周期性边界条件所得来的, 从而可将 N 层黑磷问题简化为与层数相关的有限单层黑磷系统。

表 1 5 跳连续近似结构因子^[23]

Table 1 Structure factors for five-hopping continuum approximation^[23]

Parameter	Value / eV	Parameter	Value / (10^{-20} eV · m ²)	Parameter	Value / (10^{-20} eV · m ²)	Parameter	Value / (10^{-10} eV · m)
δ_{AB}	-2.85	η_{AB}	3.91	γ_{AB}	4.41	χ_{AB}	2.41
δ_{AC}	3.61	η_{AC}	-0.53	γ_{AD}	1.01	χ_{AC}	2.84
δ_{AD}	-0.42	η_{AD}	0.58	$\gamma_{AC'}$	1.08	$\chi_{AC'}$	1.09
$\delta_{AC'}$	0.41	$\eta_{AC'}$	-0.56	$\gamma_{AD'}$	0.14		
$\delta_{AD'}$	-0.06	$\eta_{AD'}$	3.31				

根据(2)式写出不同层数黑磷的单层哈密顿量并将其代入(1)式, 将波矢点离散化之后再将其对角化, 得到的本征值和本征函数即为每一个离散化的波矢点所对应的电子能级和波函数。当一个频率为 ω 、振幅为 A 的线偏振光照射到黑磷薄片上时, 原哈

密顿量中的动量将被改写为正则动量, 即 $\hbar k_j \rightarrow P_j = \hbar k_j + eA_j$, 其中 $j = x, y$, \hbar 为约化普朗克常数, P_j 为正则动量大小, A_j 为线偏振光振幅, 因此可以写出光场下少层黑磷的哈密顿量为

$$\mathbf{H}'_n = \begin{pmatrix} u_0^{(n)} + \eta_x^{(n)} \frac{(\hbar k_x + eA_x)^2}{\hbar^2} + \eta_y^{(n)} \frac{(\hbar k_y + eA_y)^2}{\hbar^2} & \delta^{(n)} + \gamma_x^{(n)} \frac{(\hbar k_x + eA_x)^2}{\hbar^2} + \gamma_y^{(n)} \frac{(\hbar k_y + eA_y)^2}{\hbar^2} + i\chi^{(n)} \frac{\hbar k_x + eA_x}{\hbar} \\ \delta^{(n)} + \gamma_x^{(n)} \frac{(\hbar k_x + eA_x)^2}{\hbar^2} + \gamma_y^{(n)} \frac{(\hbar k_y + eA_y)^2}{\hbar^2} - i\chi^{(n)} \frac{\hbar k_x + eA_x}{\hbar} & u_0^{(n)} + \eta_x^{(n)} \frac{(\hbar k_x + eA_x)^2}{\hbar^2} + \eta_y^{(n)} \frac{(\hbar k_y + eA_y)^2}{\hbar^2} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

电子-光子相互作用的哈密顿量 \mathbf{H}_{int} 可以用光场下的总哈密顿量减去无光场的哈密顿量来获得, 即 $\mathbf{H}_{\text{int}} = \mathbf{H}'_n - \mathbf{H}_n$ 。令入射光偏振方向与扶手型边界方向 (x 方向) 的夹角为 θ , 则电子-光子相互作用

的哈密顿量可重新表示为^[22]

$$\mathbf{H}_{\text{int}} = \mathbf{H}_{A_x} + \mathbf{H}_{A_y}, \quad (4)$$

式中： \mathbf{H}_{A_x} 和 \mathbf{H}_{A_y} 分别为投射到 x 方向和 y 方向上的哈密顿量。忽略 A_x, A_y 的二阶和高阶项, \mathbf{H}_{A_x}

和 H_{A_y} 分别为

$$H_{A_x} = \begin{pmatrix} \eta_x^{(n)} \frac{2ek_x}{\hbar} & \gamma_x^{(n)} \frac{2ek_x}{\hbar} + i\chi^{(n)} \frac{e}{\hbar} \\ \gamma_x^{(n)} \frac{2ek_x}{\hbar} - i\chi^{(n)} \frac{e}{\hbar} & \eta_x^{(n)} \frac{2ek_x}{\hbar} \end{pmatrix} A \cos \theta, \quad (5)$$

$$H_{A_y} = \begin{pmatrix} \eta_y^{(n)} \frac{2ek_y}{\hbar} & \gamma_y^{(n)} \frac{2ek_y}{\hbar} \\ \gamma_y^{(n)} \frac{2ek_y}{\hbar} & \eta_y^{(n)} \frac{2ek_y}{\hbar} \end{pmatrix} A \sin \theta. \quad (6)$$

当电子吸收两个频率相同的光子时,在二阶微扰理论下,电子-光子相互作用的双光子跃迁速率表示为^[25-26]

$$W^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{c,v} |M_{c,v}^{(n)}|^2 \delta(E_c - E_v - 2\hbar\omega) \frac{d^2k}{(2\pi)^2}, \quad (7)$$

$$M_{c,v}^{(n)} = \sum_i \frac{\langle \varphi_c | \mathbf{H}_{int} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \mathbf{H}_{int} | \varphi_v \rangle}{E_i - E_v - \hbar\omega - i\hbar\gamma_i}, \quad (8)$$

式中: k 为波数; δ 为狄拉克函数; φ_v 、 φ_i 和 φ_c 分别为电子跃迁初态、中间态和末态的波函数; E_v 、 E_i 和 E_c 分别为电子跃迁初态、中间态和末态的能量; $\hbar\gamma_i$ 为各个激发态载流子的弛豫能。本文在电子能态的计算中得到的是数值解,因此不能得到跃迁选择定则的表达式,在计算时,将不能发生的跃迁的矩阵元设为 0。双光子吸收系数与双光子跃迁速率 $W^{(2)}$ 有关,可表示为

$$\beta = \frac{4\hbar\omega W^{(2)}}{I^2 d_N} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2, \quad (9)$$

式中: $I = \frac{\epsilon_\omega^{1/2} \omega^2 A^2}{2\pi c}$ 为入射光的光强, ϵ_ω 为光频介电常数, c 为真空中光速; d_N 为 N 层黑磷纳米片的厚度; ϵ_0 为真空介电常数。

3 分析与讨论

双光子吸收性质与能带结构紧密相关,载流子吸收两个光子后在能带间发生跃迁。为了更好地研究黑磷双光子吸收性质随原子层数的变化规律,图 2(a)~(c) 分别描绘了单层、双层和三层黑磷的能带结构图,其中, a_1 为相邻磷原子间的键长。从图 2 中可以清楚地看到,在低能量状态(长波极限)下,黑磷的导带和价带数目随着黑磷层数的增加而增加,并且原子层数每增加一层,导带和价带各增加一条子带,这意味着:随着原子层数的增加,出现了能带的分裂;对于双层和三层黑磷,价带内子带在 Γ 点

左侧发生交叠。图 2(d) 描绘了黑磷禁带宽度随原子层数的变化关系。可以发现,黑磷的带隙可以由层数进行调节,并且随着层数的增加,带隙逐渐减小。当原子层数超过 15 层之后,其带隙的变化就非常微小了。该研究结果与前期科学家们基于 14 跳参数连续近似模型和 10 跳参数连续近似模型所得到的不同层数黑磷在 Γ 点附近的能带结构以及禁带宽度随原子层数的变化规律相同,远离 Γ 点位置的能带结构存在微小偏差,但是并不影响本文基于次能带结构对 Γ 点附近双光子吸收性质的研究^[8,23,27]。本文计算的禁带宽度与之前 14 跳参数和 10 跳参数连续近似模型的结果稍有偏差,这是因为 5 跳参数连续近似模型忽略了层间原子之间的耦合以及层内次近邻原子之间的相互作用。黑磷中这种随原子层数增加而产生的能带分裂现象的产生原因是:随着层数的增加,层间相互作用不断增强,导致费米面整体上移,磷原子的 3p 轨道对费米面附近的导带和价带贡献发生了明显的变化,费米面附近的价带(导带)随着磷原子对 3p 轨道的贡献增大由原来少量的价带(导带)扩展成了多条价带(导带),在能带图中表现出价带和导带的分裂^[28]。而能带的分裂会带来能态密度的增大^[23]。对比图 2(a) 和图 2(c),可以发现三层黑磷第二条价带和导带与单层黑磷的价带和导带完全一样。该现象可由(2)式解释,单层黑磷哈密顿量中的矩阵元与三层黑磷中间位置的矩阵元完全相同。此外,还可以发现单层和少层黑磷能带都有着明显的各向异性特征。

图 3(a)、(b) 分别给出了单层、双层和三层黑磷分别在 x 方向(扶手型方向)和 y 方向(锯齿型方向)的双光子吸收谱。对比图 3(a)、(b) 可以发现黑磷的双光子吸收在 x 和 y 方向上存在明显的各向异性。在 x 方向上,黑磷的最强吸收峰的峰值大小的数量级在 10^{-16} m/W 左右;而在 y 方向上,最强吸收峰峰值大小的数量级只在 10^{-26} m/W 左右。这可以解释为:黑磷在动量空间中的低能量等能线展示沿 x 方向的能带比沿 y 方向的能带增长得更快,即能态密度更大,导致沿着 x 方向的电子跃迁多于沿 y 方向的电子跃迁^[23]。与黑磷相关的纳米材料的双光子吸收系数的实验结果^[14-16] 相比,本文的计算结果偏小,其原因是:一方面,实验样品的层数并不单一,而计算中没有考虑到样品厚度的分布函数;另一方面,有些样品呈现量子点形态,更强的量子限制效应提高了态密度,从而增强了双光子吸收效应。此外,随着层数增加,能带变多,能态密

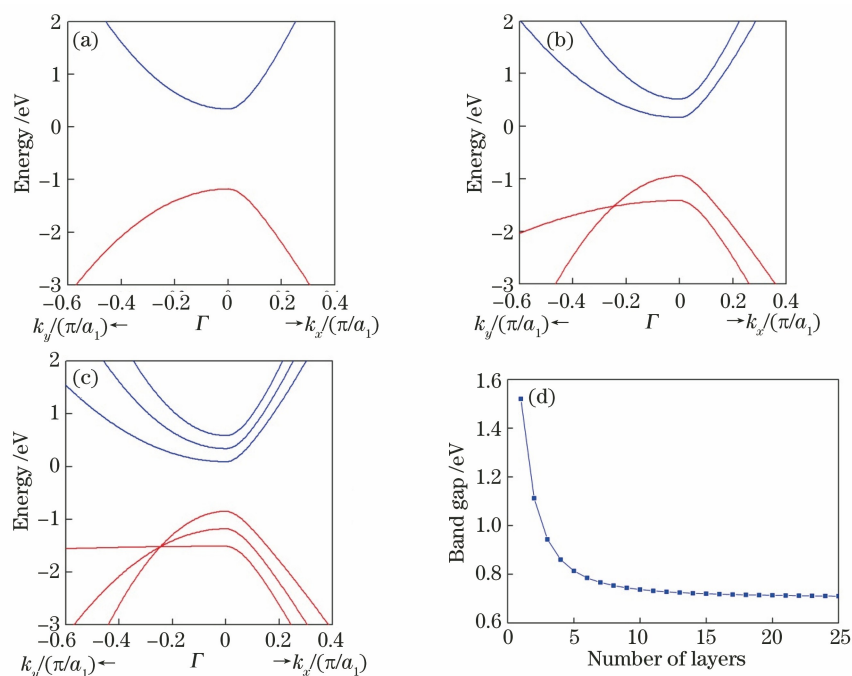


图 2 黑磷的能带结构图以及禁带宽度随原子层数的变化。(a)单层黑磷;(b)双层黑磷;
(c)三层黑磷;(d)禁带宽度随层数的变化

Fig. 2 Energy band structure of black phosphorus and variation in band gap width with number of layers. (a) Monolayer black phosphorus; (b) bilayer black phosphorus; (c) trilayer black phosphorus; (d) variation in band gap width with number of layers

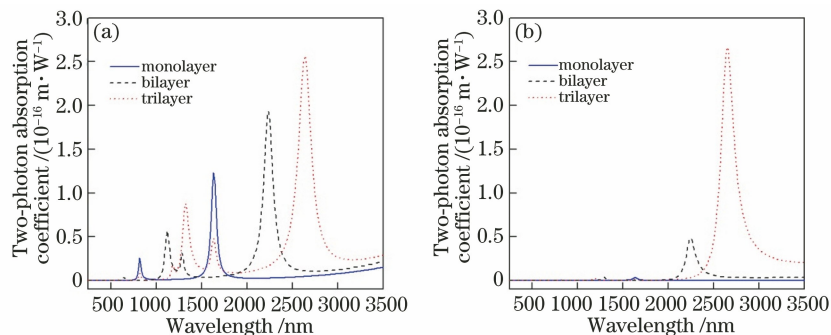


图 3 单层、双层和三层黑磷的双光子吸收谱。(a)偏振方向沿 x 方向;(b)偏振方向沿 y 方向

Fig. 3 Two-photon absorption spectra of monolayer, bilayer, and trilayer black phosphorus. (a) Incident light is polarized along x direction; (b) incident light is polarized along y direction

度增大,电子跃迁数随之增多,所以可以观察到黑磷的双光子吸收系数随着层数的增加而增大。由于随着层数的增加,带隙减小,因此双光子吸收峰发生红移。通过观察图 3(a),可以清晰地看出单层黑磷具有 2 个吸收峰,双层黑磷具有 4 个吸收峰,三层黑磷具有 6 个吸收峰,并且三层黑磷的两个吸收峰对应的波长与单层黑磷的两个吸收峰对应的波长相同。这种现象的产生归因于三层黑磷的能带结构中的一条导带和一条价带与单层黑磷的导带与价带完全一致,三层黑磷的有效哈密顿量的表达式也可以对此进行解释。简而言之,通过调节黑磷的层数,可以有效地控制双光子吸收的波段和强度。

基于黑磷能带结构的各向异性,为了探究入射光偏振方向与黑磷双光子吸收谱的关系,绘出了单层、双层和三层黑磷在不同偏振方向下双光子吸收系数随入射波长变化的二维图,如图 4 所示。图中展示了入射线偏振光的偏振角度 θ 为 $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ 时单层、双层和三层黑磷的双光子吸收光谱。双光子吸收系数随着入射光偏振角从 0° 增加到 90° 而减小,当入射光偏振方向与 x 方向一致时双光子吸收系数达到最大值,当入射光偏振方向与 y 方向一致时双光子吸收系数达到最小值。这一结果与 Sun 等课题组对于偏振相关黑磷非线性光学吸收的实验研究结果完全一致,与他人的理论结果也一

致^[19,29]。因此,也可以通过调节线偏振光的入射角度或者偏振方向来控制黑磷的双光子吸收强度。

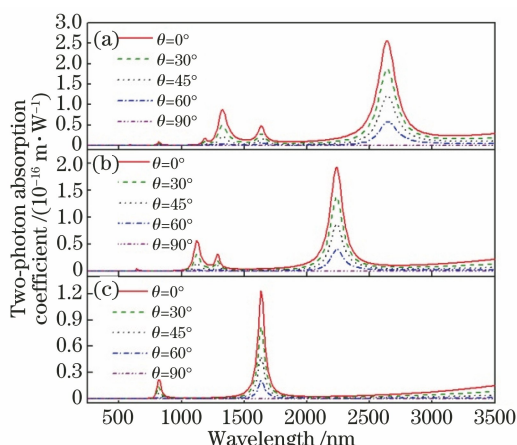


图 4 入射光不同偏振方向下黑磷的双光子吸收谱。

(a) 三层黑磷; (b) 双层黑磷; (c) 单层黑磷

Fig. 4 Two-photon absorption spectra of black phosphorus with different polarization directions. (a) Trilayer black phosphorus; (b) bilayer black phosphorus; (c) monolayer black phosphorus

单层、双层以及三层黑磷的非线性光学响应随着入射光偏振方向的变化均显示出明显的各向异性,图 5 中描绘了双光子吸收峰的峰值对偏振方向的依赖性,即不同层数黑磷的最大双光子吸收峰的峰值随线偏振光偏振角度(与扶手型方向平行时偏振角为 0°)的变化。此时入射光的波长分别固定为 1633 nm、2240 nm 和 2636 nm 左右。3 种情况下,黑磷的双光子吸收系数都以 π 为周期随线偏振光偏振角度的改变而改变。当偏振光方向与 x 轴方向一致时,双光子的吸收系数达到最大,当偏振光方向与 y 轴方向一致时,双光子吸收系数为最小值,黑磷双光子吸收峰的峰值随入射角变化的函数是一个与 $\cos \theta$ 相关的函数。这种周期函数关系与实验结

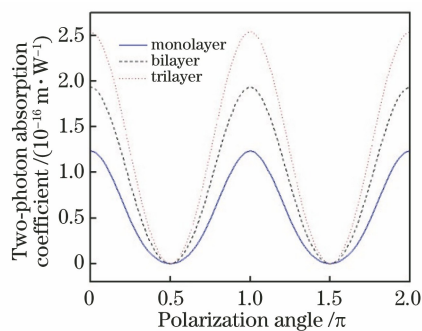


图 5 双光子吸收峰峰值随偏振方向的变化

Fig. 5 Variation in two-photon absorption peak with polarization direction

果完全一致^[19,30]。

4 结 论

基于低能量近似理论下的 5 跳参数束缚模型,通过数值计算得到了单层、双层和三层黑磷的能带结构,并通过电子-光子相互作用的二阶微扰理论,模拟了不同层数黑磷的双光子吸收谱。研究发现,随着黑磷层数的增加,导带和价带间的禁带宽度不断减小。层数和入射光偏振方向是影响黑磷双光子的吸收强度的重要因素。黑磷的双光子吸收系数随着层数的增加而增加,并且吸收峰伴随层数的增加发生红移,这归因于层数的增加带来能带间隔的减小和能态密度的增大。三层黑磷双光子吸收谱中的两个吸收峰位置与单层黑磷双光子吸收谱的吸收峰位置相同,这归因于三层黑磷的能带结构中一条导带和一条价带与单层黑磷的导带与价带完全一致。黑磷的双光子吸收存在强烈的各向异性。当线偏振光方向沿着扶手型方向时,黑磷的双光子吸收系数最大,随着入射角度的增大吸收系数减小,直至偏振方向与锯齿型方向一致后吸收系数达到最小,并且扶手型方向上的吸收系数比锯齿型方向上的吸收系数高出 10 个数量级。同时,在同一波长下,吸收系数与入射光偏振角度按余弦函数呈现周期性变化。此各向异性特点与实验研究结果完全一致。上述结果为黑磷在检偏器以及其他光电器件方面的运用都提供了一定的理论指导。

参 考 文 献

- [1] Li L K, Yu Y J, Ye G J, et al. Black phosphorus field-effect transistors [J]. *Nature Nanotechnology*, 2014, 9(5): 372-377.
- [2] Du K X, Deng S K, Chen X B, et al. Preparation and property characterization of single-crystal black phosphorus by mineralization [J]. *Acta Optica Sinica*, 2019, 39(12): 1216001.
杜凯翔, 邓书康, 陈小波, 等. 黑磷单晶的矿化法制备及性能表征 [J]. *光学学报*, 2019, 39(12): 1216001.
- [3] Xia F N, Wang H, Jia Y C. Rediscovering black phosphorus as an anisotropic layered material for optoelectronics and electronics [J]. *Nature Communications*, 2014, 5: 4458.
- [4] Qiao J, Kong X, Hu Z X, et al. High-mobility transport anisotropy and linear dichroism in few-layer black phosphorus [J]. *Nature Communications*, 2014, 5: 4475.

- [5] Liu Y, Low T, Ruden P P. Mobility anisotropy in monolayer black phosphorus due to scattering by charged impurities[J]. *Physical Review B*, 2016, 93(16): 165402.
- [6] Tran V, Soklaski R, Liang Y F, et al. Layer-controlled band gap and anisotropic excitons in few-layer black phosphorus [J]. *Physical Review B*, 2014, 89(23): 235319.
- [7] Xiong F, Zhang J F, Zhu Z H, et al. Strong anisotropic perfect absorption in monolayer black phosphorus and its application as tunable polarizer [J]. *Journal of Optics*, 2017, 19(7): 075002.
- [8] Pereira J M, Katsnelson M I. Landau levels of single-layer and bilayer phosphorene [J]. *Physical Review B*, 2015, 92(7): 075437.
- [9] Buscema M, Groenendijk D J, Blanter S I, et al. Fast and broadband photoresponse of few-layer black phosphorus field-effect transistors[J]. *Nano Letters*, 2014, 14(6): 3347-3352.
- [10] Yu X H, Du K X, Yang P Z. Preparation of low-dimensional black phosphorus and its application in solar cells [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2019, 56(14): 140001.
余夏辉, 杜凯翔, 杨培志. 低维黑磷制备及其在太阳能电池中的应用研究进展 [J]. *激光与光电子学进展*, 2019, 56(14): 140001.
- [11] Zhang S F, Zhang X Y, Wang H, et al. Size-dependent saturable absorption and mode-locking of dispersed black phosphorus nanosheets [J]. *Optical Materials Express*, 2016, 6(10): 3159-3168.
- [12] Xu M, Gu Y Q, Peng R M, et al. Black phosphorus mid-infrared photodetectors [J]. *Applied Physics B*, 2017, 123(4): 1-5.
- [13] Hernandez F E, Belfield K D, Cohanoschi I. Three-photon absorption enhancement in a symmetrical charge transfer fluorene derivative [J]. *Chemical Physics Letters*, 2004, 391(1/2/3): 22-26.
- [14] Zheng X, Chen R, Shi G, et al. Characterization of nonlinear properties of black phosphorus nanoplatelets with femtosecond pulsed Z-scan measurements [J]. *Optics Letters*, 2015, 40(15): 3480-3483.
- [15] Jiang X F, Zeng Z K, Li S, et al. Tunable broadband nonlinear optical properties of black phosphorus quantum dots for femtosecond laser pulses [J]. *Materials*, 2017, 10(2): 210.
- [16] Chen R, Tang Y, Zheng X, et al. Giant nonlinear absorption and excited carrier dynamics of black phosphorus few-layer nanosheets in broadband spectra [J]. *Applied Optics*, 2016, 55(36): 10307-10312.
- [17] Wang K P, Szydłowska B M, Wang G Z, et al. Ultrafast nonlinear excitation dynamics of black phosphorus nanosheets from visible to mid-infrared [J]. *ACS Nano*, 2016, 10(7): 6923-6932.
- [18] Xu Y H, Jiang X F, Ge Y Q, et al. Size-dependent nonlinear optical properties of black phosphorus nanosheets and their applications in ultrafast photonics [J]. *Journal of Materials Chemistry C*, 2017, 5(12): 3007-3013.
- [19] Li D, Jussila H, Karvonen L, et al. Polarization and thickness dependent absorption properties of black phosphorus: new saturable absorber for ultrafast pulse generation [J]. *Scientific Reports*, 2015, 5: 15899.
- [20] Margulis V A, Muryumin E E, Gaiduk E A. Optical Kerr effect and two-photon absorption in monolayer black phosphorus [J]. *Journal of Optics*, 2018, 20(5): 055503.
- [21] Liu Y, Feng X B, Qin Y G, et al. Width dependent two-photon absorption in monolayer black phosphorus nanoribbons [J]. *Applied Sciences*, 2019, 9(10): 2014.
- [22] Luo X, Feng X, Liu Y, et al. Rashba spin-orbit coupling enhanced two-photon absorption and its polarization dependence in monolayer black phosphorus [J]. *Optics Express*, 2020, 28(7): 9089-9098.
- [23] de Sousa D J P, de Castro L V, da Costa D R, et al. Multilayered black phosphorus: from a tight-binding to a continuum description [J]. *Physical Review B*, 2017, 96(15): 155427.
- [24] He S, Yang M, Wang R Q. Double band-inversions of bilayer phosphorene under strain and their effects on optical absorption [J]. *Chinese Physics B*, 2018, 27(4): 047303.
- [25] Li Z S, Feng X B. Theoretical study on two-photon absorption associated with intraband transitions in graphene quantum disks [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2017, 54(3): 031901.
李志松, 冯小波. 石墨烯量子盘带内跃迁双光子吸收理论研究 [J]. *激光与光电子学进展*, 2017, 54(3): 031901.
- [26] Fedorov A V, Baranov A V, Inoue K. Two-photon transitions in systems with semiconductor quantum dots [J]. *Physical Review B*, 1996, 54(12): 8627-8632.
- [27] Rudenko A N, Yuan S, Katsnelson M I. Approximation to large-scale tight-binding simulations [J]. *Physical Review B*, 2015, 92(8): 085419.
- [28] Ju W W, Li T W, Yong Y L, et al. Band gap of few-

layer black phosphorus modulated by thickness and strain[J]. *Journal of Atomic and Molecular Physics*, 2015, 32(2): 329-335.

据伟伟, 李同伟, 雍永亮, 等. 多层黑磷中厚度和应力依赖的能隙变化研究[J]. *原子与分子物理学报*, 2015, 32(2): 329-335.

[29] Yang M, Duan H J, Wang R Q. The tunable

electronic structure and optic absorption properties of phosphorene by a normally applied electric field[J]. *Physica Scripta*, 2016, 91(10): 105801.

[30] Youngblood N, Peng R M, Nemilentsau A, et al. Layer-tunable third-harmonic generation in multilayer black phosphorus[J]. *ACS Photonics*, 2017, 4(1): 8-14.