Энергетический спектр и оптическое поглощение в квантовой проволоке монослоя дихалькогенидов переходных металлов

Витлина Р.З.¹, Магарилл Л.И.^{1,2}, Чаплик А.В.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

DOI 10.34077/Semicond2019-209

Теоретически исследуется одночастичный спектр и оптическое поглощение в квантовой проволоке монослоя дихалькогенидов переходных металлов, то есть в прямолинейной полосе ширины L . Рассмотрение основано на минимальной двухзонной модели с гамильтонианом дираковского типа с учётом спинового расщепления, как в валентной зоне, так и в зоне проводимости [1-2]. При решении соответствующего волнового уравнения используется граничное условие на спинорную волновую функцию, обеспечивающее отсутствие тока, нормального к краям полосы [3-5]. Найдены законы дисперсии подзон размерного квантования. Показано существование состояний, возникающих вблизи краёв полосы. Соответствующие уровни энергии существуют при выполнении условия $L > 2\gamma/\Delta$, (γ – межзонная скорость, Δ – ширина запрещённой зоны) и лежат в запрещённой зоне. С увеличением L эти уровни энергии при нулевом импульсе k_x (k_x – импульс вдоль полосы) стремятся к точкам внутри щели $\pm(\lambda_v + \lambda_c)/2$, где λ_c , λ_v – параметры спинового расщепления в зоне проводимости и в валентной зоне в безграничном монослое. Зависимости энергии краевых состояний и состояний подзон от k_x найдены в аналитическом виде. Графики этих

Рис.1. – Размерно-квантованный спектр (показано по две подзоны в с- и v- зонах) и уровни краевых состояний для полосы с шириной $L=20$ А. Красные и синие линии соответствуют двум различным проекциям спина.

Рис.2. – То же, что на Рис.1 для $L=100$ А.

зависимостей приведены на рисунках для двух значений ширины полосы $L_1=10$ А и $L_2=100$ А. В первом случае расстояние между первой и второй подзонами размерного квантования больше, а во втором меньше спинового расщепления. Параметры материала соответствуют MoS_2 .

Кроме того, исследовано поглощение света круговой поляризации для переходов между подзонами валентной зоны и зоны проводимости, а также для переходов из краевого состояния в подзону зоны проводимости и из подзоны валентной зоны в краевое состояние.

Работа была поддержана РФФ (грант № 17-12-01039).

[1] D.Xiao, G.-B.Liu et al., *Phys.Rev.Lett.*, **108**,196802 (2012).

[2] A.Kormanyos et al., *2D Materials*, **2**, 022001 (2015).

[3] M.V.Berry et al., *Proc.R.Soc. Lond.*, **A412**, 53 (1987).

[4] P.Recher et al., *Phys.Rev.B*, **76**, 235404 (2007).

[5] Fanyao Ou et al., *Scientific Reports*, |7:41044| (2017), DOI:10.1038/srep 41044.