

Министерство образования и науки Российской Федерации
Московский физико-технический институт (государственный университет)

Физтех-школа физики и исследований им. Ландау
Кафедра проблем теоретической физики

Выпускная квалификационная работа бакалавра

Энергетический спектр и транспорт экситонов в муаровых сверхрешетках

Автор:

Студент Б02-014 группы
Шенцев Александр Михайлович

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., чл.-кор. РАН
Глазов Михаил Михайлович



Москва 2024

Аннотация

В данной работе построена теория энергетического спектра и диффузии экситонов, локализованных в узлах двумерной сверхрешетки. Такие системы могут быть реализованы в двуслойных атомарно-тонких полупроводниковых кристаллах на основе дихалькогенидов переходных металлов за счет эффектов муара. Предполагается, квантовомеханическое туннелирование частиц подавлено, а основным механизмом переноса экситонов между узлами является дальнедействующее диполь-дипольное взаимодействие, за счет которого экситон, возбужденный на одном узле решетки, может испустить виртуальный фотон и рекомбинировать, возбуждая экситон на другом узле решетки. На примере треугольной решетки показано, что имеются две ветви в энергетическом спектре экситонов, отличающиеся ориентацией микроскопического дипольного момента экситона. В пределе малых волновых векторов по сравнению с обратным периодом решетки одна из них – «поперечная» – является бездисперсионной, а вторая – «продольная» – обладает линейной дисперсией. На основе найденной дисперсии были рассчитаны коэффициенты диффузии экситонов с учетом их взаимодействия со статическим беспорядком и длинноволновыми продольными акустическими фононами как в квазиклассическом, так и в прыжковом режимах транспорта в таких структурах. Показано, что и в том, и в другом режиме коэффициент диффузии зависит от температуры степенным образом.

Содержание

1 Введение	4
2 Постановка задачи	6
2.1 Взаимодействие экситона с полем	6
2.2 Эффективный гамильтониан	8
3 Дисперсия экситонов	10
3.1 Анализ спектра	11
3.2 Поляризация экситонов	13
3.3 Оценка скорости экситонов	14
4 Диффузия экситонов	16
4.1 Квазиклассический режим	16
4.2 Рассеяние на точечных дефектах	17
4.3 Рассеяние на продольных акустических фононах	18
4.4 Прыжковый режим	19
5 Заключение	22
Список литературы	23

1 Введение

Физика двумерных или, как их ещё называют, атомарно-тонких материалов активно развивается последние несколько десятилетий [1]. Важной точкой развития этой области стали работы А. Гейма и К. Новосёлова, которые получили монослой графита (графен) и исследовали его физические свойства [2], а после и другие двумерные кристаллы: BN, MoS₂, NbSe₂, Bi₂Sr₂CaCuO_x [3], при помощи микромеханического расщепления – «отшелушивания».

В частности, монослой дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ), о которых пойдет речь в дальнейшем, являются весьма интересным двумерными полупроводниками с шириной запрещённой зоны ~ 2 эВ. Их оптические свойства тоже весьма необычны [4], во многом они определяются экситонами – связанными за счёт кулоновского взаимодействия состояниями пары электрон-дырка, которые имеют энергию связи в десятые доли эВ, что всего на порядок меньше ширины запрещённой зоны. Это происходит по причине относительно больших эффективных масс электрона и дырки, а также слабости экранировки в тонких плёнках [5].

Метод «отшелушивания» оказался удобным как своей относительной простотой и дешевизной, так и тем, что открыл доступ к широкому набору ван-дер-ваальсовых гетероструктур, в них слои различных материалов расположены друг над другом, словно в конструкторе «лего». В частности, можно располагать слои под углом к друг другу и тем самым получать новые структуры – муар, отсутствующие в исходных материалах и обладающие весьма разнообразными свойствами [6]. Из-за небольшого относительного рассогласования постоянных решеток ($\sim 1\%$) или угла разворота между слоями ($\sim 1^\circ$) в муаровых системах взаиморасположение атомов между слоями (stacking) меняется в плоскости слоёв решётки образуя узор, названный в честь "мохеровой" ткани, см. рис. 1.



Рис. 1: Муаровая лента. Из https://ru.wikipedia.org/wiki/Муаровый_узор.

Поскольку в силу немного разных постоянных решётки или небольшого угла между слоями возникает почти периодичная картина, можно говорить о совместной, муаровой сверхрешётке, см. рис. 2, период которой a много больше периодов $a_{1,2}$ исходных решёток [7; 8].

Наличие муара существенно влияет на электронный спектр, оптические и транспортные свойства ван-дер-ваальсовых гетероструктур. Например, в бесщелевом графене могут за счёт муара формироваться плоские зоны [6; 7]. В дихалькогенидах переходных металлов муар приводит к модуляции ширины запрещённой зоны [10], что

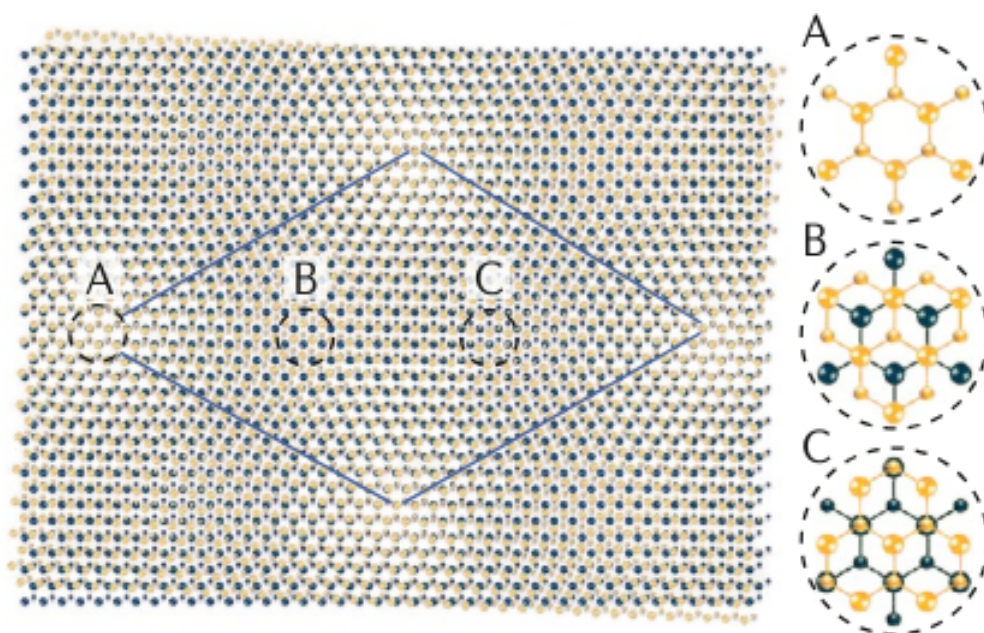


Рис. 2: Пример муаровой сверхрешётки на основе монослоев дихалькогенидов переходных металлов. Из [9].

создает дополнительный потенциал, действующий на экситоны. Это в совокупности с важностью экситонных состояний для двумерных дихалькогенидов переходных металлов определяет важность и актуальность исследований экситонных состояний в структурах с муаром [11].

Цель данной работы — построить теорию энергетического спектра экситонов в муаровых сверхрешетках на основе атомарно-тонких кристаллов с учетом взаимодействия экситонов с порождаемым ими электромагнитным полем, а также теоретически исследовать распространение экситонов в таких системах.

2 Постановка задачи

Рассмотрим муаровую сверхрешётку на основе двух монослоев дихалькогенидов переходных металлов, расположенных один над другим. В качестве модельной системы можно иметь в виду структуру $\text{MoSe}_2/\text{WSe}_2$, но конкретные материалы для нашего рассмотрения роли не играют. За счет слабого межслоевого взаимодействия в ней происходит модуляция ширины запрещённой зоны, которая приводит к возникновению эффективного периодического потенциала, действующего на экситоны [10]. Минимумы потенциала образуют треугольную решётку [7; 8], см. рис. 3, поэтому в дальнейшем наши вычисления сделаны для этой геометрии, хотя полученные результаты качественно не зависят от формы решётки. Характерная глубина минимумов составляет $\sim 10 \dots 100$ мэВ и при периоде муара в ~ 10 нм квантовомеханическое туннелирование экситонов с эффективной массой $\sim m$, где m – масса свободного электрона, пренебрежимо мало. Поэтому, как правило, обсуждается локализация экситонов в минимумах сверхрешетки (ширина минизон мала) и ожидается, что их распространение подавлено [12–15].

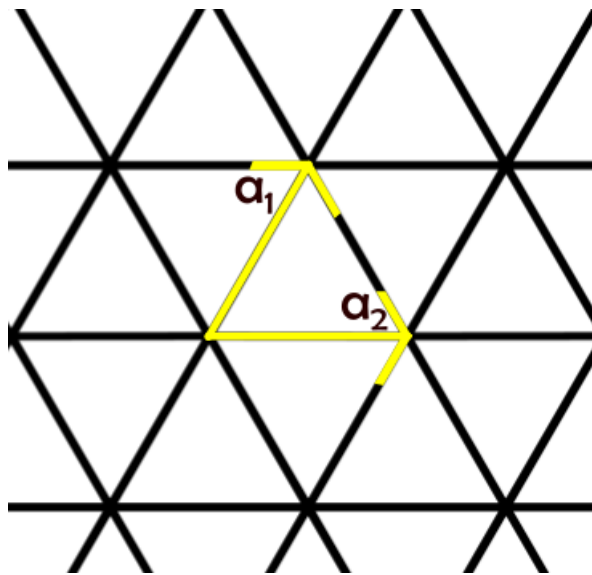


Рис. 3: Рассматриваемая решётка и её базисные векторы \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 .

Однако, экситоны в дихалькогенидах переходных металлов оптически-активны. Это означает, что экситон может порождать электромагнитное поле и взаимодействовать с ним. Таким образом, переходы экситонов между минимумами потенциала могут осуществляться через электромагнитное поле. Именно такую ситуацию мы и будем изучать.

2.1 Взаимодействие экситона с электромагнитным полем

Для описания взаимодействия экситонов с электромагнитным полем будем считать, что базис блоховских состояний для дна зона проводимости (индекс c) состоит из аксиально-симметричной функции $S(\mathbf{r})$, а для потолка валентной зоны (индекс v) – из двух функций p -типа $X(\mathbf{r})$, $Y(\mathbf{r})$, преобразующихся как координаты x и y , соответственно.¹ Тогда оператор дипольного момента \mathbf{d} имеет ненулевые матричные элементы:

$$\langle S | d_x | X \rangle = \langle S | d_y | Y \rangle = d_{cv}, \quad (1)$$

¹Строго говоря, в долине \mathbf{K}_+ состояние потолка валентной зоны преобразуется как $X - iY$, а в долине \mathbf{K}_- как $X + iY$ при определенном выборе центра преобразований точечной группы структуры [16]. Здесь и далее спин и спин-орбитальное взаимодействие не учитываем, в рассматриваемых системах оно приводит к перенормировке ширины запрещенной зоны.

где, например, $\langle S | d_x | X \rangle = (e/V_0) \int_{V_0} S^*(\mathbf{r}) x X(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$, e – заряд электрона, и интегрирование ведется по элементарной ячейке исходного кристалла, V_0 – ее объем. В представлении вторичного квантования оператор дипольного момента в данной поляризации $\alpha = x$ или y записывается как:

$$\hat{d}_\alpha = d_{cv}(\mathbf{k}) a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\alpha,\mathbf{k}} + h.c. = d_{cv}(\mathbf{k}) a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{h,\alpha,-\mathbf{k}} + h.c. \quad (2)$$

Здесь $a_{i,\mathbf{k}}^\dagger$ – оператор рождения электрона с квазиимпульсом \mathbf{k} в зоне $i = v, c$, аналогично $a_{h\mathbf{k}\alpha}^\dagger = a_{v\mathbf{k}\alpha}$ – оператор рождения дырки.

В представлении вторичного квантования состояние кристалла с одним экситоном записывается как

$$|exc\rangle = \sum_{\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h} F(\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h) a_{c\mathbf{k}_e}^\dagger a_{h\mathbf{k}_h}^\dagger |\Omega\rangle, \quad (3)$$

где $|\Omega\rangle$ – основное состояние, в котором все электроны находятся в валентной зоне; $F(\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h)$ – волновая функция экситона в \mathbf{k} представлении. Тогда экситону соответствует дипольным момент:

$$\mathbf{d}_{exc} = \langle exc | \mathbf{d} | \Omega \rangle = \sum_{\mathbf{k}} F^*(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) \mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k}) \approx \mathbf{d}_{cv} \sum_{\mathbf{k}} F^*(\mathbf{k}, -\mathbf{k}). \quad (4)$$

Отметим, что $\sum_{\mathbf{k}} F^*(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ равна огибающей волновой функции относительного движения электрона и дырки при совпадающих координатах частиц, волновым вектором света по сравнению с периодом исходных и муаровой решетки пренебрегаем. В зависимости от выбора функции F и величины d_{cv} развиваемая модель может быть применима как к внутри-, так и к межслоевым экситонам.

Взаимодействие экситона с электромагнитным полем можно получить исходя из одночастичного гамильтониана электрона в периодическом потенциале решетки:

$$\hat{H}_e = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - e\phi + V(\mathbf{r}); \quad \hat{\mathbf{p}} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}, \quad (5)$$

где $V(\mathbf{r})$ – периодический потенциал исходной решётки, \mathbf{A}, ϕ – векторный и скалярный потенциал электромагнитного поля; напомним, что m – масса свободного электрона. Используя калибровку для электромагнитных волн $\varphi = 0$, $\text{div} \mathbf{A} = 0$ и считая поле гармоническим:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}; \quad \mathbf{A} = -i \frac{c}{\omega} \mathbf{E}, \quad (6)$$

вклад, описывающий взаимодействия для уравнения (5) можно записать в виде:

$$\hat{M} = i \frac{e}{\omega m} \mathbf{E} \hat{\mathbf{p}} = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \left[\frac{\hat{H}}{\omega}, \mathbf{r} \right]. \quad (7)$$

Здесь было учтено, что, по определению,

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \mathbf{r} \right]. \quad (8)$$

Тогда в представлении вторичного квантования (7) имеет вид:

$$\hat{M} \approx - \sum_{\alpha, \mathbf{k}} E_\alpha d_{cv} a_{c\mathbf{k}}^\dagger a_{h,\alpha-\mathbf{k}}^\dagger + h.c. \quad (9)$$

Мы пренебрегли зависимостью $\mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k})$ и $\omega(\mathbf{k}) = E_c(\mathbf{k}) - E_h(\mathbf{k})$ от волнового вектора \mathbf{k} , что допустимо для прямых разрешенных оптических переходов. Также мы считали

поле \mathbf{E} однородным, что соответствует экспериментальной ситуации: как уже отмечалось, длина волны света на частоте перехода ω значительно больше периода исходной решётки и муара.

Таким образом возбуждению экситона соответствует матричный элемент:

$$\langle exc | \hat{M} | \Omega \rangle = - \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{E} d_{cv} F^*(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) = - \mathbf{E} d_{exc}, \quad d_{exc,\alpha} = d_{cv} \sum_{\mathbf{k}} F^*(\mathbf{k}, -\mathbf{k}), \quad (10)$$

а экситон можно рассматривать как микроскопический, осциллирующий на частоте $\omega_0 = (E_g - E_B)/\hbar$ (E_g – ширина запрещенной зоны, E_B – энергия связи), дипольный момент, локализованный на данном узле муаровой решетки.

2.2 Эффективный гамильтониан экситонов в муаровой решетке

Будем рассматривать экситонное состояние на узле i -ом узле решётки, в пренебрежении туннелированием оно будет собственным для исходного (без взаимодействия с электромагнитным полем) гамильтониана:

$$\hat{H}_0 |exc_i\rangle = \hbar\omega_0 |exc_i\rangle. \quad (11)$$

Состояние экситона в муаровой сверхрешётке запишем в узельном представлении как:

$$|exc\rangle = \sum_i C_i |exc_i\rangle, \quad (12)$$

где C_i – коэффициенты разложения, удовлетворяющие условию нормировки: $\sum_i |C_i|^2 = 1$. В общих формулах индекс, отвечающий за поляризацию, опускаем.

Представим напряжённость электрического поля на i -ом узле в виде

$$\mathbf{E}_i = \hat{\mathbf{E}}_i = \sum_j \hat{G}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \hat{\mathbf{d}}_j, \quad (13)$$

где \hat{G} – диадная функция Грина (функция Грина уравнений Максвелла):

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = -\frac{\delta_{\alpha\beta}}{3q^2} \delta(r) + \frac{e^{iqr}}{4\pi r} \left[\frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} + \left(\frac{3r_\alpha r_\beta}{r^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \left(\frac{1}{(qr)^2} - \frac{i}{qr} - \frac{1}{3} \right) \right], \quad (14)$$

а $\hat{\mathbf{d}}_j$ – дипольные моменты, создаваемые экситонами на узлах j . Подчеркнем, что и поля, и дипольные моменты осциллируют на частоте $\omega \approx \omega_0$. Формула (9) даёт электрическое поле, испытываемое экситоном на i -ом узле. Тогда с учётом взаимодействия экситона с полем (9) полный гамильтониан системы выглядит так:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \sum_{i,j} \hat{\mathbf{d}}_i G_{ij} \hat{\mathbf{d}}_j + h.c., \quad (15)$$

где $G_{ij} = \hat{G}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ Условие на коэффициенты C_i можно найти из вырожденной теории возмущений:

$$\langle exc_i | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | exc \rangle = C_i \hbar\omega_0 - \sum_{j \neq i} \mathbf{d}_{exc,i} G_{ij} C_j \mathbf{d}_{exc,j}^*. \quad (16)$$

С учетом того, что $|exc\rangle$ должно быть собственным состоянием с энергией $\hbar\omega$ имеем

$$\hbar(-\omega + \omega_0) C_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{d}_{exc,i} G_{ij} C_j \mathbf{d}_{exc,j}^*. \quad (17)$$

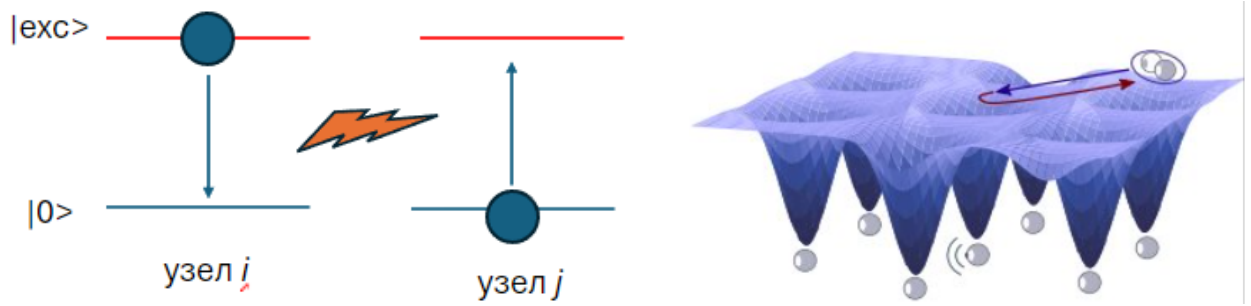


Рис. 4: Экситон как двухуровневая система (слева), сверхрешетка (справа).

Из уравнения (17) можно получить уравнение на поляризацию, создаваемую экситоном на i -ом узле в виде

$$\hbar(-\omega + \omega_0)\mathbf{p}_i = |\mathbf{d}_{exc}|^2 \sum_{j \neq i} G_{ij} \mathbf{p}_j = |\mathbf{d}_{exc}|^2 \mathbf{E}_i. \quad (18)$$

Можно дать физическую интерпретацию ответа, рассматривая нашу систему как решётку двухуровневых систем, см. рис. 4. Гамильтониан для узла (site) выглядит в базисе состояний $|exc\rangle$ (есть экситон) и $|0\rangle$ (нет экситона) следующим образом:

$$H_s = \begin{pmatrix} E_{exc} & -\mathbf{E}\mathbf{d}_{exc} \\ -\mathbf{E}\mathbf{d}_{exc}^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Волновая функция на i -ом узле есть линейная комбинация заполненного и пустого состояния:

$$|\psi_i\rangle = C_1^i |exc\rangle + C_0^i |0\rangle. \quad (20)$$

Учтя низкую заселённость на узлах $|C_1^i| \ll 1$, $C_0^i \approx 1$ и малость взаимодействия, получим (18).

Интересным в результате (18) является то, что данное выражение есть резонансное приближения взаимодействия классических диполей с электромагнитным полем:

$$\ddot{\mathbf{p}}_i + \omega_0^2 \mathbf{p}_i = \xi^2 \mathbf{E}_i. \quad (21)$$

Здесь точка сверху – производная по времени, и мы ввели эффективную константу взаимодействия ξ^2 . Исходя из предыдущих вычислений она выражается как:

$$\xi^2 = \frac{2\omega_0 |\mathbf{d}_{exc}|^2}{\hbar}. \quad (22)$$

Таким образом наша задача свелась к задаче классической электродинамики. Поэтому мы проведём вычисления для уравнения (21), а затем рассмотрим резонансное приближение.

3 Дисперсия экситонов

Теперь перейдём к определению энергетического спектра рассматриваемой системы. Перепишем уравнение (21) в виде, добавив для общности вклад с первой производной по времени, учитывающий нерадиационное затухание экситонов (считаем, что константа затухания $\gamma \ll \omega_0$):

$$\ddot{\mathbf{p}}_{\mathbf{r}} + 2\gamma\dot{\mathbf{p}}_{\mathbf{r}} + \omega_0^2\mathbf{p}_{\mathbf{r}} = \xi^2 \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \frac{3(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \mathbf{p}_{\mathbf{r}'}) (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 \mathbf{p}_{\mathbf{r}'}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^5}. \quad (23)$$

. Здесь $\mathbf{r} = \mathbf{a}_1 n_1 + \mathbf{a}_2 n_2$; $\mathbf{r}' = \mathbf{a}_1 n'_1 + \mathbf{a}_2 n'_2$, n_1, n_2, n'_1, n'_2 – целые числа. Для треугольной решётки (см. рис. 3) базисные вектора прямой и обратных решёток имеют вид:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad (24)$$

где a – период муаровой сверхрешётки.

Будем искать решения в виде, соответствующем теореме Блоха для муаровой сверхрешётки

$$\mathbf{p}_{\mathbf{r}} = e^{-i\omega t + i(\mathbf{k}\mathbf{r})} \mathbf{p}_{\mathbf{k}}. \quad (25)$$

Подстановка (25) в уравнение (23) даёт:

$$(-\omega^2 - 2i\gamma\omega + \omega_0^2)\mathbf{p}_{\mathbf{k}} = \xi^2 \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r}' - \mathbf{r})} \frac{3(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \mathbf{p}_{\mathbf{k}}) (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 \mathbf{p}_{\mathbf{k}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^5}. \quad (26)$$

Представим левую часть уравнения (26) в матричном виде, а также учтём трансляционную инвариантность.

$$(\mathbf{r}, \mathbf{p}_{\mathbf{k}}) \mathbf{r} / r^2 = \begin{pmatrix} n^x (n^x p_{\mathbf{k}}^x + n^y p_{\mathbf{k}}^y) \\ n^y (n^x p_{\mathbf{k}}^x + n^y p_{\mathbf{k}}^y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n^x n^x & n^x n^y \\ n^x n^y & n^y n^y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{\mathbf{k}}^x \\ p_{\mathbf{k}}^y \end{pmatrix} \quad (27)$$

$$(-\omega^2 - 2i\gamma\omega + \omega_0^2)\mathbf{p}_{\mathbf{k}} = \xi^2 \left(\sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r}')} \frac{3 \begin{pmatrix} n^x n^x & n^x n^y \\ n^x n^y & n^y n^y \end{pmatrix} - 1}{r^3} \right) \mathbf{p}_{\mathbf{k}} \quad (28)$$

Выражения (28) разрешимо при равенстве нулю детерминанта, что даёт условие на ω :

$$\det \left[\omega^2 + 2i\gamma\omega - \omega_0^2 + \xi^2 \left(\sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r}')} \frac{3 \begin{pmatrix} n^x n^x & n^x n^y \\ n^x n^y & n^y n^y \end{pmatrix} - 1}{r^3} \right) \right] = 0. \quad (29)$$

Для краткости записи удобно ввести следующие обозначения:

$$a_c(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r}')} \frac{\cos 2\theta}{r^3} = \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \frac{\cos(\mathbf{k}\mathbf{r}') \cos 2\theta}{r^3}, \quad (30)$$

$$a_s(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r}')} \frac{\sin 2\theta}{r^3} = \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \frac{\cos(\mathbf{k}\mathbf{r}') \sin 2\theta}{r^3}, \quad (31)$$

$$F_0(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \frac{e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r}')}}{r^3} = \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \frac{\cos(\mathbf{k}\mathbf{r}')}{r^3}. \quad (32)$$

Тогда последнее слагаемое в уравнение (29) можно записать в виде:

$$\sum_{\mathbf{r} \neq 0} e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r})} \frac{3 \begin{pmatrix} n^x n^x & n^x n^y \\ n^x n^y & n^y n^y \end{pmatrix} - 1}{r^3} = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} F_0(\mathbf{k}) + a_c(\mathbf{k}) & a_s(\mathbf{k}) \\ a_s(\mathbf{k}) & F_0(\mathbf{k}) - a_c(\mathbf{k}) \end{pmatrix} - F_0(\mathbf{k}). \quad (33)$$

Здесь так же использована формула для косинуса двойного угла:

$$\cos^2 \theta = \frac{1}{2} + \frac{\cos 2\theta}{2}. \quad (34)$$

В результате несложных вычислений имеем дисперсионное уравнение

$$(\omega^2 + 2i\gamma\omega)^2 - 2(\omega^2 + 2i\gamma\omega)[\omega_0^2 - \xi^2 F_0(\mathbf{k})/2] + B(\mathbf{k}) = 0, \quad (35)$$

где для краткости обозначено:

$$B(\mathbf{k}) = [\omega_0 - \xi^2 F_0(\mathbf{k})/2]^2 - \frac{9}{4} \xi^2 [a_c^2(\mathbf{k}) + a_s^2(\mathbf{k})]. \quad (36)$$

Выражение (35) – биквадратное уравнение, решение которого даёт:

$$\omega^2 + 2i\gamma\omega = \omega_0^2 - \xi^2 \frac{F_0(\mathbf{k})}{2} \pm \sqrt{\left(\omega_0^2 - \xi^2 \frac{F_0(\mathbf{k})}{2}\right)^2 - B(\mathbf{k})}, \quad (37)$$

или

$$\omega^2 + 2i\gamma\omega = \omega_0^2 - \xi^2 \frac{F_0(\mathbf{k})}{2} \pm \frac{3\xi^2}{2} \sqrt{a_c^2(\mathbf{k}) + a_s^2(\mathbf{k})}. \quad (38)$$

Далее введём слагаемое, которое содержит всю зависимость от волнового вектора \mathbf{k} :

$$F_{\pm}(\mathbf{k}) = -\frac{F_0(\mathbf{k})}{2} \pm \frac{3}{2} \sqrt{a_c^2(\mathbf{k}) + a_s^2(\mathbf{k})}. \quad (39)$$

Таким образом из уравнения (38) мы получаем две ветки $\omega(\mathbf{k})$:

$$\omega_{\pm}(\mathbf{k}) = -i\gamma + \sqrt{\omega_0^2 + \xi^2 F_{\pm}(\mathbf{k}) - \gamma^2}. \quad (40)$$

Два нефизических решения с положительной мнимой частью были отброшены.

В рамках резонансного приближения, где $\gamma, \xi/a^{3/2} \ll \omega_0$, выражение (40) переписывается в виде:

$$\omega_{\pm}(\mathbf{k}) = i\gamma + \omega_0 + \frac{1}{2} \frac{\xi^2}{\omega_0} F_{\pm}(\mathbf{k}). \quad (41)$$

3.1 Анализ спектра

На рис. 5 показан спектр экситонов в муаровой решётке, рассчитанный по формуле (41). Главной особенностью полученного спектра является **линейная** дисперсия ветви $\omega_+(\mathbf{k})$ при малых волновых векторах вблизи Γ -точки зоны Бриллюэна. Это связано с тем, что производная от ω при законе убывания членов ряда $1/r^3$ в двумерном случае имеет неаналитическую особенность в нуле.

Коэффициент линейной зависимости можно вычислить, пересуммировав формально расходящееся выражение для dF_{\pm}/dk по векторам обратной решётки. Для этого воспользуемся тождеством:

$$\sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = \frac{1}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{G}, \mathbf{r})}, \quad (42)$$

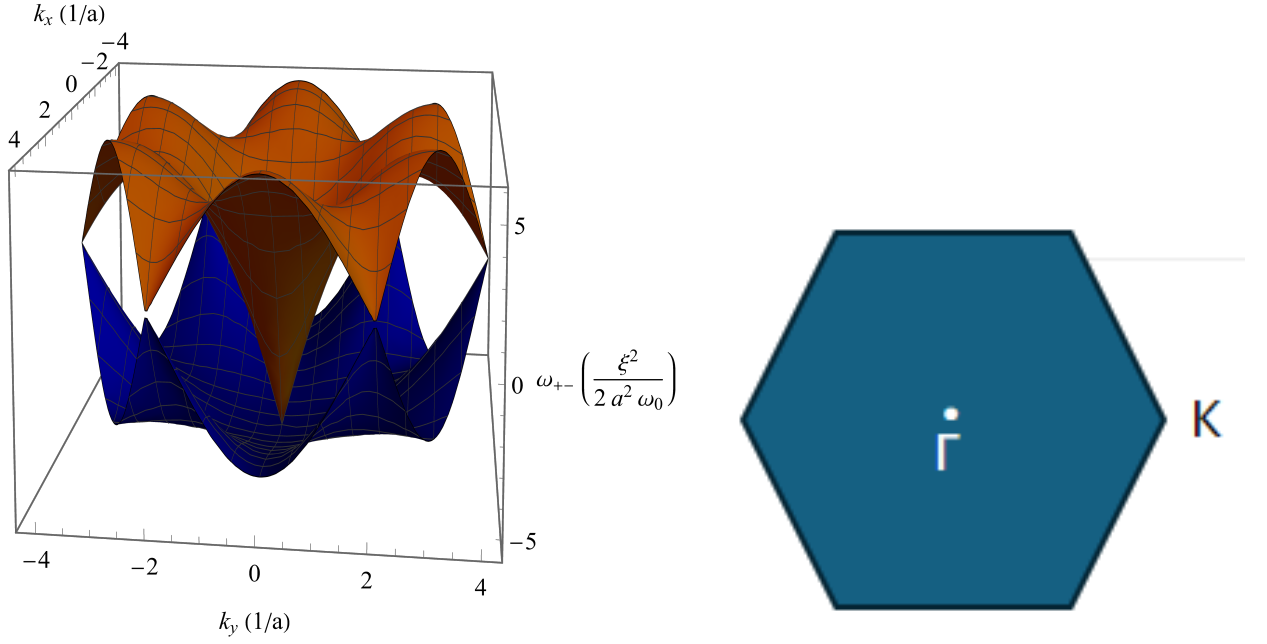


Рис. 5: Левая панель: график зависимостей $\omega_+(\mathbf{k})$ (оранжевый) и $\omega_-(\mathbf{k})$ (синий). Правая панель: зона Бриллюэна треугольной решётки.

где Ω_0 – объём элементарной ячейки муаровой сверхрешетки. Перепишем сумму в (32):

$$F_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} \int_{r_0}^{\infty} \frac{e^{i|\mathbf{G}+\mathbf{k}|r \cos \varphi}}{r^3} r dr \varphi + f(r_0, \mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} \int_{r_0}^{\infty} \frac{J_0(|\mathbf{G} + \mathbf{k}|r)}{r^2} dr + f(r_0, \mathbf{k}). \quad (43)$$

Здесь J_n - функция Бесселя n -ого порядка, а $r_0 \sim a$ - нижний предел интегрирования, так как узел с $\mathbf{r} = 0$ исключен из исходной суммы. Как мы увидим далее, для расчета линейного по k вклада в дисперсию значение r_0 играть роли не будет, $f(r_0, \mathbf{k})$ – функция, связанная с интегрированием в области $\sim r_0$, она аналитична по \mathbf{k} и в нуле имеет нулевую производную. Ряд для производной F_0 вблизи $\mathbf{k} = 0$ выглядит следующим образом:

$$\frac{dF_0(\mathbf{k})}{dk} = \frac{2\pi}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} \frac{d|\mathbf{G} + \mathbf{k}|}{dk} \int_{r_0}^{\infty} \frac{J'_0(|\mathbf{G} + \mathbf{k}|r)}{r} dr = \quad (44)$$

$$= -\frac{2\pi}{\Omega_0} \int_0^{\infty} \frac{J_1(x)}{x} dx = -\frac{2\pi}{\Omega_0}. \quad (45)$$

Заметим, что в выражении (44) слагаемые нулевого порядка по k , зауляются везде, кроме части с $\mathbf{G} = \mathbf{0}$. С учетом свойства функций Бесселя $dJ_0(x)/dx = -J_1(x)$ и в пределе $kr_0 \rightarrow 0$ получаем (45).

Дальше легко проверить, что $a_c(0) = a_s(0) = 0$. Это сразу же видно для $a_s(0)$, из нечётности $\sin(2\theta)$. В случае a_c из симметрии следует, что при повороте на $\pi/3$ выражение не меняется, тогда $\cos(2\pi/3)a_c(0) = a_c(0)$, поэтому $a_c(0) = 0$. Перепишем по аналогии с (43) выражения (30), (31):

$$a_c(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} \cos(2\varphi_0^{\mathbf{G}}) \int_{r_0}^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{e^{i|\vec{\mathbf{G}}+\vec{\mathbf{k}}|r \cos(\varphi)} \cos(2\varphi)}{r^2} dr d\varphi + f_c, \quad (46)$$

$$a_s(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} \sin(2\varphi_0^{\mathbf{G}}) \int_{r_0}^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{e^{i|\vec{\mathbf{G}}+\vec{\mathbf{k}}|r \cos(\varphi)} \cos(2\varphi)}{r^2} dr d\varphi + f_s. \quad (47)$$

Здесь φ_0^G - угол от оси OX к $\mathbf{G} + \mathbf{k}$. В пределе $k \rightarrow 0$, первый порядок по k только при $\mathbf{G} = \mathbf{0}$. Тогда значение интеграла в правой части формул (46) и (47) будет:

$$\int_{r_0}^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{e^{ikr \cos(\varphi)} \cos(2\varphi)}{r^2} dr d\varphi = -2\pi k \int_0^{\infty} \frac{J_2(x)}{x^2} dx = -\frac{2\pi k}{3}. \quad (48)$$

Из (48) и (46), (47) следует:

$$\sqrt{a_c^2(\mathbf{k}) + a_s^2(\mathbf{k})} \simeq \frac{2\pi k}{3\Omega_0}; \quad k \rightarrow 0. \quad (49)$$

Окончательно, из (41) при малых k (вблизи центра зоны Бриллюэна), отбросив мнимую часть, получаем дисперсию экситонов с учетом их взаимодействия с электромагнитным полем:

$$\omega_+(\mathbf{k}) = \tilde{\omega} + \frac{\pi\xi^2}{\omega_0\Omega_0}k, \quad \omega_-(\mathbf{k}) = \tilde{\omega} + o(k). \quad (50)$$

Здесь $\tilde{\omega} = \omega_0 - \frac{\xi^2}{4\omega_0}F_0(0)$ - резонансная частота, перенормированная светоэкситонным взаимодействием. Если учесть, что для треугольной решётки объём элементарной ячейки равен $\Omega_0 = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$, то:

$$\omega_+ = \tilde{\omega} + \frac{\xi^2}{2\omega_0} \times \frac{4\pi}{\sqrt{3}a^2}k \equiv c_x k, \quad c_x = \frac{d\omega(k)}{dk} = \frac{\xi^2}{2\omega_0} \times \frac{4\pi}{\sqrt{3}a^2}, \quad (51)$$

где c_x - групповая скорость экситонов.

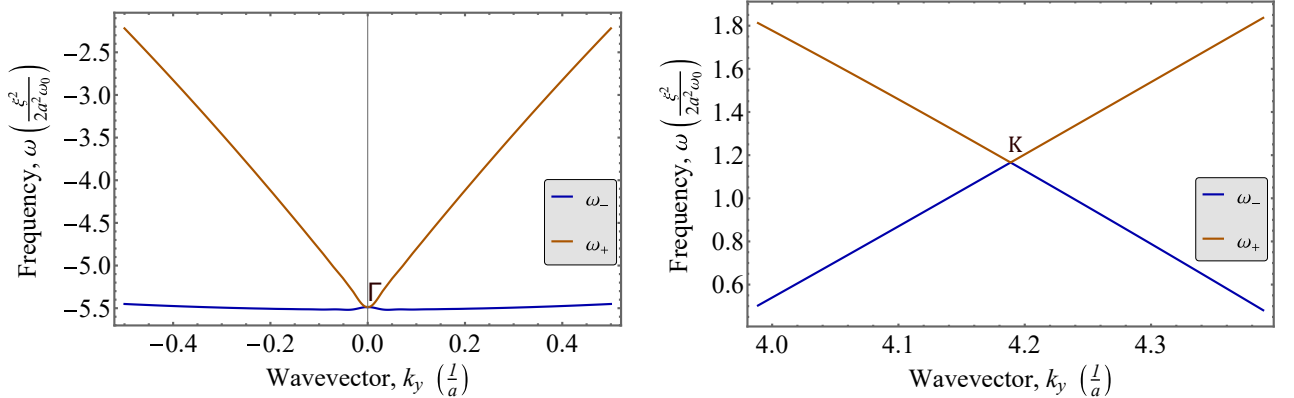


Рис. 6: Проекция экситонного спектра при $k_x = 0$ (вдоль оси ΓK).

В точках K на спектре присутствуют конусы Дирака, их наличие обусловлено (как и в графене) симметрией системы. Численный расчёт показывает, что вблизи дираковских точек \mathbf{k}_0 дисперсия имеет вид:

$$\omega = const \pm \frac{2.22\xi^2}{\omega_0 a^2} |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|. \quad (52)$$

3.2 Поляризация экситонов

Теперь перейдём к задаче отыскания собственных векторов в уравнение (28). Напомним, что их физический смысл - ориентация дипольного момента экситона. Подставив (38) в (29) имеем:

$$\begin{pmatrix} F_{\pm} + F_0/2 + \frac{3}{2}a_c & \frac{3}{2}a_s \\ \frac{3}{2}a_s & F_{\pm} + F_0/2 - \frac{3}{2}a_c \end{pmatrix} \mathbf{p}_{\pm} =$$

$$= \frac{3}{2} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{a_c^2 + a_s^2} + a_c & \\ a_s & \pm\sqrt{a_c^2 + a_s^2} - a_c \end{pmatrix} \mathbf{p}_{\pm} = 0. \quad (53)$$

Удобно ввести следующие обозначения:

$$\cos \alpha = \frac{a_c}{\sqrt{a_c^2 + a_s^2}}, \quad \sin \alpha = \frac{a_s}{\sqrt{a_c^2 + a_s^2}}. \quad (54)$$

Тогда уравнение на поляризации экситонов выглядят как:

$$(\pm 1 + \cos \alpha) p_{\pm}^x + p_{\pm}^y \sin \alpha = 0. \quad (55)$$

Удобно их записать через тангенс и воспользоваться формулой тангенса половинного угла:

$$\operatorname{tg} \theta_{\pm} = \frac{p_{\pm}^y}{p_{\pm}^x} = \frac{(\mp 1 - \cos \alpha)}{\sin \alpha}, \quad \operatorname{tg} \theta_- = \operatorname{tg}(\alpha/2), \quad \operatorname{tg} \theta_+ = -\operatorname{ctg}(\alpha/2), \quad (56)$$

где θ_{\pm} – угол наклона поляризации экситона \mathbf{p} к оси OX . Для малых волновых векторов поляризацию можно получить явно. Для этого обратимся к выражениям для $a_c(\mathbf{k})$, $a_s(\mathbf{k})$ в виде (46), (47). В них при малых k видно, что:

$$a_c(\mathbf{k}) = -\operatorname{const} \cdot \cos 2\varphi_0; \quad a_s(\mathbf{k}) = -\operatorname{const} \cdot \sin 2\varphi_0, \quad (57)$$

где φ_0 – угол между осью OX и волновым вектором \mathbf{k} . Отсюда следует связь между φ_0 и α :

$$\alpha = 2\varphi_0 + \pi. \quad (58)$$

Таким образом для (56) имеем:

$$\operatorname{tg} \theta_- = \operatorname{tg}(\varphi_0 + \pi/2) = -\operatorname{ctg} \varphi_0; \quad \operatorname{tg} \theta_+ = \operatorname{tg} \varphi_0. \quad (59)$$

Это означает, что $\mathbf{p}_+ \parallel \mathbf{k}$ и $\mathbf{p}_- \perp \mathbf{k}$. Таким образом, одна из ветвей, а именно ветвь ω_+ , соответствует «продольным» экситонам и имеет линейную дисперсию:

$$\omega_L(\mathbf{k}) = i\gamma + \omega_0 - \frac{\xi^2}{4\omega_0} F_0(0) + \frac{\xi^2}{2\omega_0} \times \frac{4\pi}{\sqrt{3}a^2} k. \quad (60)$$

Вторая ветвь, ω_- , отвечает «поперечным» экситонам, их дисперсия слабо зависит от волнового вектора \mathbf{k} :

$$\omega_T(\mathbf{k}) = i\gamma + \omega_0 - \frac{\xi^2}{4\omega_0} F_0(0). \quad (61)$$

3.3 Оценка скорости экситонов

Согласно (10) дипольный момент экситона записывается следующим образом:

$$d_{exc} = \sum_{\mathbf{k}} F^*(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) d_{cv} \sim d_{cv} \frac{a_{loc}}{a_{exc}}, \quad (62)$$

где a_{exc} – характерный размер экситона боровский радиус, а a_{loc} – характерный радиус его локализации. Теперь запишем формулу (22) через p_{cv} – матричный элемент импульса.

$$\xi^2 \sim \frac{2\omega_0 e^2}{\hbar} \left| \frac{p_{cv}}{m\omega_0} \right|^2 \left(\frac{a_{loc}}{a_{exc}} \right)^2. \quad (63)$$

Воспользуемся результатами численных расчётов из обзора [17]. Из них следует, что $\gamma = \hbar p_{cv}/m \sim 2 - 3$ эВ \cdot Å . В выражение (51) возьмём $\omega_0 \sim 10^{15}$ с $^{-1}$, $a \sim 5$ нм и для грубой оценки положим $a_{exc} = a_{loc}$.

$$c_x \sim \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{\gamma}{\hbar \omega_0} \right)^2 \times \frac{4\pi}{\sqrt{3}a^2} \sim 4 \cdot 10^4 \frac{\text{М}}{\text{с}} \quad (64)$$

В зависимости от параметров системы скорость продольных экситонов составляет $\sim 0,01 - 0,1\%$ скорости света в вакууме.

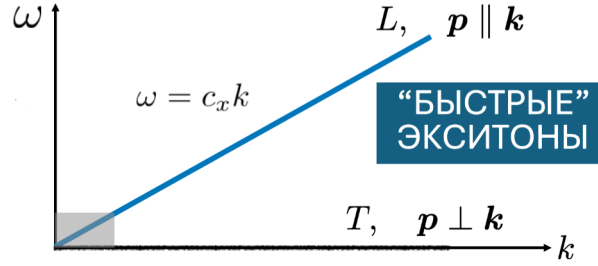


Рис. 7: Схематичный вид экситонного спектра вблизи Г-точки.

Приближение линейной дисперсии экситонов становится неприменимым и при малых волновых вектора $k \lesssim \omega_0/c$, когда дисперсионные ветви экситона оказываются внутри светового конуса, и экситоны испытывают радиационное затухание. С точки зрения развитой теории нарушается приближение мгновенности распространения света, использованное в формуле (23). Соответственно, серой областью на рис. 7 условно отмечена область, в которой нельзя пренебрегать запаздыванием света. Она имеет порядок волновых векторов $\sim 10^4 \frac{1}{\text{см}}$, что много меньше зоны Бриллюэна $\sim \frac{\pi}{a} \sim 10^6 \frac{1}{\text{см}}$. Для нахождения спектра в этой области можно заменить решеточную сумму в правой части уравнения (18) на интеграл, вычисление которого даёт:

$$(\omega - \omega_0)\delta_{\alpha\beta}p_{\beta\mathbf{k}} = -q^2 c_x \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{q^2} \right) p_{\beta\mathbf{k}} \begin{cases} \frac{i}{\sqrt{q^2 - k^2}}, & k < q, \\ \frac{1}{\sqrt{k^2 - q^2}}, & k > q, \end{cases} \quad (65)$$

где $q = \frac{\omega}{c}$. Дисперсия двумерных экситонов в континуальном пределе проанализирована в работе [18]. Вне светового конуса, $k \gg q$, но $k \ll \pi/a$ результаты [18] и данного рассмотрения совпадают.

4 Диффузия экситонов

Перейдём к задаче о распространении экситонов. Она привлекает широкий экспериментальный и теоретический интерес, см., например, обзор [19]. В ван-дер-ваальсовых гетероструктурах диффузия экситонов наблюдалась, например, в работах [20; 21]. В экспериментально исследуемых структурах всегда присутствует определённый беспорядок связанный, например, с флуктуациями глубин потенциальных ям или расстояниями между ними, что может приводить к локализации экситонов на таких дефектах. При конечной температуре имеет место экситон-фононное взаимодействие. Таким образом в зависимости от температуры и силы беспорядка есть два принципиально разных режима транспорта:

1) **Квазиклассический режим** – свободное перемещение экситонов по решётке, с относительно редким рассеянием экситонов на дефектах и фононах.

2) **Прыжковый режим** – состояния локализованы. В этом случае экситоны "прыгают" между этими состояниями за счёт поглощения и излучения фононов.

Квазиклассический режим реализуется, при условии, что $k_B T \gg \hbar/\tau$, где T – температура, k_B – постоянная Больцмана, а τ – характерное время рассеяния, найденное в борновском приближении. Если $k_B T \ll \hbar/\tau$, то говорят о локализации и прыжковом транспорте. Между этими режимами также выделяют режим со слабой локализацией, в котором важна интерференция квазиклассических траекторий. Ниже мы рассмотрим характерные особенности транспорта, а именно, определим температурную зависимость коэффициента диффузии продольных экситонов в муаровой сверхрешетке в предельных случаях 1 и 2, не затрагивая промежуточный режим. Далее мы будем рассматривать распространение именно продольных экситонов, так как в пренебрежении квантовомеханическим туннелированием между минимумами потенциала сверхрешетки поперечные экситоны не обладают дисперсией и, следовательно, не могут распространяться.

Нас будет интересовать коэффициент диффузии D экситонов, который связывает плотность потока квазичастиц i и градиент их концентрации n

$$i = -D\nabla n. \quad (66)$$

Именно такой диффузионный режим распространения экситонов и реализуется в экспериментах [19].

4.1 Квазиклассический режим

Для получения коэффициента диффузии, можно воспользоваться стандартным приёмом, решая кинетическое уравнение Больцмана, для стационарного распределения при наличии постоянного градиента химического потенциала.

$$\frac{\mathbf{F}}{\hbar} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = I_c, \quad \mathbf{F} = -\nabla \mu, \quad (67)$$

где $f(\mathbf{k})$ - экситонная функция распределения, I_c - интеграл столкновений, μ - химический потенциал. В τ -приближении интеграл столкновений записывается следующим образом:

$$I_c = -\frac{f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})}{\tau_{\mathbf{k}}}, \quad (68)$$

где $\tau_{\mathbf{k}}$ – время релаксации, f_0 – равновесная (в отсутствии \mathbf{F}) функция распределения. Тогда в линейном по градиенту μ приближении выражение (67) принимает вид:

$$f = f_0 - \tau_{\mathbf{k}}(\mathbf{F}\mathbf{v}(\mathbf{k})) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}. \quad (69)$$

Здесь мы воспользовались тем, что $\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{d\varepsilon}{d\mathbf{k}} = \hbar \mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$. Используя (69), считая спектр экситонов изотропным, а время рассеяния зависящим лишь от энергии экситона, $\tau_{\mathbf{k}} = \tau(\varepsilon)$, получим поток экситонов, вызванный градиентом химического потенциала, в виде

$$\mathbf{i} = - \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \tau_{\mathbf{k}} (\mathbf{F} \mathbf{v}(\mathbf{k})) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\mathbf{F} \int \frac{v(\varepsilon)^2}{2} \tau(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon = bn\mathbf{F}. \quad (70)$$

Здесь b – подвижность, n – концентрация экситонов, $\nu(\varepsilon)$ – плотность состояний с энергией ε . Ввиду слабой заселённости экситонных состояний равновесная функция распределения описывается статистикой Больцмана – $f_0 = \exp(-\varepsilon/k_B T)$.² Тогда используя соотношение Эйнштейна – $D_{cl} = k_B T b$ и (51) имеем:

$$D_{cl} = \frac{\int \frac{v_k^2}{2} \tau(\varepsilon) e^{-\varepsilon/k_B T} \nu(\varepsilon) d\varepsilon}{\int e^{-\varepsilon/k_B T} \nu(\varepsilon) d\varepsilon} = \frac{c_x^2}{2} \langle \tau \rangle_{\varepsilon}; \quad \langle \tau \rangle_{\varepsilon} = \frac{\int \tau(\varepsilon) e^{-\varepsilon/k_B T} \nu(\varepsilon) d\varepsilon}{\int e^{-\varepsilon/k_B T} \nu(\varepsilon) d\varepsilon}. \quad (71)$$

4.2 Рассеяние на точечных дефектах

Рассмотрим рассеяние на короткодействующих дефектах по теории возмущений. Потенциал возмущения запишем следующим образом:

$$V(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \times \sum_i v_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (72)$$

где $v_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ – потенциал i -ого дефекта, который находится в точке R_i . Матричный вид $V(\mathbf{r})$ обусловлен наличием двух поляризаций экситонов. Тогда интеграл столкновений можно записать при помощи золотого правила Ферми:

$$I_c = \frac{2\pi}{\hbar} \int S \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} |V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}|^2 (f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})) \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')). \quad (73)$$

Здесь и далее S – нормировочная площадь, $V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}$ матричный элемент возмущения между состояниями с волновым вектором \mathbf{k} и \mathbf{k}' :

$$V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} = \frac{1}{S} \sum_i \int d^2 r v_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}} \mathbf{u}_{\mathbf{k}'}^\dagger(\mathbf{r}) \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (74)$$

а $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ – блоховская амплитуда, периодическая с периодом сверхрешётки. Напомним, что для продольного экситона $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \parallel \mathbf{k}$. Пусть дефекты одинаковы и находятся в узлах решётки, тогда в силу периодичности $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, все слагаемые в (74) отличаются лишь фазой из-за разного расположения в пространстве:

$$V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} = \frac{1}{S} \sum_i v_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{R}_i}. \quad (75)$$

Возведя в квадрат и пренебрегая интерференцией между слагаемыми, получим:

$$|V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}|^2 \approx \frac{N}{S^2} |v_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}|^2 = \frac{n}{S} |v_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}|^2, \quad (76)$$

где введена концентрация дефектов n . Подставив (76) в (73) получим:

$$I_c = \frac{2\pi n}{\hbar} \int \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} |v_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}|^2 (f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})) \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')); \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar c_x k. \quad (77)$$

²В эксперимента, как правило, равновесие в ансамбле экситонов устанавливается на временах, значительно более коротких, чем время жизни экситонов.

После взятия интеграла по энергиям учтём изотропность равновесного распределения по импульсам, обозначив отклонение за f_1 :

$$I_c = \frac{2\pi n}{\hbar} \int |v_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}|^2 (f_1(\mathbf{k}') - f_1(\mathbf{k})) \frac{1}{\hbar c_x} \frac{k}{(2\pi)^2} d\varphi'. \quad (78)$$

В первом порядке малости по \mathbf{F} функция $f_1(\mathbf{k})$ может зависеть лишь от скалярного произведения $\mathbf{F} \cdot \mathbf{k}$:

$$f_1(\mathbf{k}) = \eta(\varepsilon) \mathbf{k} \cdot \mathbf{F} = \eta(\varepsilon) k F \cos \alpha_{\mathbf{k}}, \quad (79)$$

где $\alpha_{\mathbf{k}}$ – угол между волновым вектором \mathbf{k} и \mathbf{F} .

$$I_c = \frac{nk}{\hbar^2 c_x} \eta(\varepsilon) k F \int |v_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}|^2 (\cos \alpha_{\mathbf{k}'} - \cos \alpha_{\mathbf{k}}) \frac{d\varphi'}{2\pi} \quad (80)$$

$$\cos \alpha_{\mathbf{k}'} = \cos(\alpha_{\mathbf{k}} + \varphi') = \cos \alpha_{\mathbf{k}} \cos \varphi' - \sin \alpha_{\mathbf{k}} \sin \varphi' \quad (81)$$

Из чётности подинтегрального выражения по φ' – угла между \mathbf{k} и \mathbf{k}' следует, что интеграл столкновения (80) записывается в τ приближении:

$$I_c = f_1(\mathbf{k}) \frac{nk}{\hbar^2 c_x} \int |v_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}|^2 (\cos \varphi' - 1) \frac{d\varphi'}{2\pi}; \quad \frac{1}{\tau_k} = \frac{nk}{\hbar^2 c_x} \int |v_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}|^2 (1 - \cos \varphi') \frac{d\varphi'}{2\pi}. \quad (82)$$

Фурье образ короткодействующего дефекта $v_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ слабо зависит от волновых векторов \mathbf{k}, \mathbf{k}' , и его можно заменить на константу:

$$v_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \int d^2 r v(r) e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}'}^\dagger(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx U \cos \varphi'. \quad (83)$$

В этом случае частота рассеяния пропорциональна волновому вектору:

$$\frac{1}{\tau_k} = k \frac{nU^2}{2\hbar^2 c_x}. \quad (84)$$

Для коэффициента диффузии при рассеянии на статических дефектах получаем следующее выражение

$$D_{cl}^{def} = \frac{\hbar^2 c_x^3}{nU^2} \frac{\int e^{-\hbar c_x k / k_B T} \frac{1}{k} k dk}{\int e^{-\hbar c_x k / k_B T} k dk} = \frac{2}{k_B T} \frac{\hbar^3 c_x^4}{2nU^2} \propto T^{-1}. \quad (85)$$

Подчеркнем отличие этого результата от коэффициента диффузии экситонов с параболической дисперсией, где $D_{cl} \propto T$ при рассеянии на статических «короткодействующих» дефектах.

4.3 Рассеяние на продольных акустических фононах

Важным источником рассеяния могут являться фононы. Рассмотрим основной механизм рассеяния экситонов на длинноволновых акустических фононах, описываемый деформационным потенциалом:

$$U^{DP} = i\Xi_c \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \times \sum_{\mathbf{q}} q \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{LA}(\mathbf{q})S} \right)^{1/2} (\hat{b}_{LA,\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} - i\omega t} - \hat{b}_{LA,\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} + i\omega t}). \quad (86)$$

Здесь $\omega_{LA}(\mathbf{q}) = s|\mathbf{q}|$ – дисперсия продольных акустических фононов, где s – скорость звука. Ξ_c – константа деформационного потенциала, ρ – двумерная плотность кристалла. Запишем интеграл столкновений:

$$I_c = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{S d^2 k'}{(2\pi)^2} N(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 (f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})) \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')). \quad (87)$$

Оценки согласно формуле (64) и данным из [22] показывают, что $c_x/s \sim 10 - 100$. Это означает, что фонон, с тем же импульсом, имеет значительно меньшую энергию по сравнению с экситоном, поэтому экситон-фононное рассеяние оказывается квазиупругим. Это позволило упростить интеграл столкновений, игнорируя различие скоростей испускания и поглощения фононов. Здесь $N(q) \gg 1$ – функция распределения фононов, $M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ – матричный элемент экситон-фононного взаимодействия:

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = i\Xi_c \left(\frac{\hbar|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|}{2\rho S s} \right)^{1/2} \cos(\varphi). \quad (88)$$

Так как нас интересуют экситоны с энергией порядка температуры, то в их рассеяние основную роль играют фононы с тем же импульсом. Их же энергия намного меньше $k_B T$, тем самым $N(q)$ принимает вид:

$$N(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar s|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|}{k_B T}\right) - 1} \approx \frac{k_B T}{\hbar s|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|}. \quad (89)$$

После подстановки (88), (89) в (87) интеграл столкновений, действующий на неравновесную поправку к функции распределения, принимает вид

$$I_c = \frac{k_B T \Xi_c^2}{\rho \hbar^3 s^2 c_x} k \int |\cos \varphi'|^2 (f_1(\mathbf{k}') - f_1(\mathbf{k})) \frac{d\varphi'}{2\pi} = -f_1(\mathbf{k}) \frac{k_B T \Xi_c^2}{2\rho \hbar^2 s^2 c_x} k. \quad (90)$$

Окончательно, из (71) и (90) получим время релаксации импульса

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{k_B T \Xi_c^2}{2\rho \hbar^2 s^2 c_x} k, \quad (91)$$

и коэффициент диффузии экситонов при рассеянии на длинноволновых акустических фононах

$$D_{cl}^{ph} = \frac{\rho \hbar^2 s^2 c_x^3}{k_B T \Xi_c^2} \int e^{-\hbar c_x k / k_B T} \frac{1}{k} k dk = \frac{2}{(k_B T)^2} \frac{\rho \hbar^3 s^2 c_x^4}{2\Xi_c^2} \propto T^{-2}. \quad (92)$$

В отличие от систем с параболической дисперсией, постоянство групповой скорости экситонов и линейная зависимость плотности состояний от энергии приводит к спаду коэффициента диффузии экситонов с ростом температуры в муаровых сверхрешетках решетках.

4.4 Прыжковый режим

Теперь перейдём к рассмотрению прыжкового режима, основная особенность которого заключается в дальнедействующем характере прыжков. Будем считать, что экситонные локализованные состояния разбросаны случайным образом в пространстве координат и энергий. Рассмотрим два состояния с энергиями U_1 и U_2 , для удобства введём обозначение $\Delta = |U_1 - U_2|$ для энергетического расстояния между ними. Гамильтониан этих состояний запишем в виде:

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} U_1 & \frac{t}{R^3} \\ \frac{t^*}{R^3} & U_2 \end{pmatrix}. \quad (93)$$

Здесь t – эффективная константа переноса между узлами, и мы явно выделили зависимость от расстояния в виде R^{-3} . Для достаточно далеких центров $|t|/R^{-3} \ll \Delta$, что

позволяет использовать теорию возмущений для нахождения «подмешиваний» волновых функций:

$$|\psi_1\rangle \approx |1\rangle + \frac{t}{\Delta R^3} |2\rangle \quad |\psi_2\rangle \approx |2\rangle - \frac{t^*}{\Delta R^3} |1\rangle, \quad (94)$$

где $|1\rangle, |2\rangle$ - соответствуют невозмущённым состояниям на узлах 1 и 2. Важно подчеркнуть, что в двумерной задаче $1/R^3$ сходится, тем самым поправка к волновой функции конечна [23], и учёт других состояний даст аддитивную добавку.³ За счёт излучения или поглощения фонона возможны перескоки между состояниями: $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$. В качестве примера возьмём деформационный потенциал в виде (86). Тогда частота перехода с поглощением фонона:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \int N(\mathbf{q}) |M_{\mathbf{q}}|^2 \delta(\Delta - \hbar s q) \frac{S d^2 q}{(2\pi)^2}. \quad (95)$$

Здесь, как и раньше, $N(\mathbf{q})$ – функция распределения фононов, $M(\mathbf{q})$ – матричный элемент перехода при участии фонона с импульсом \mathbf{q} . Он в данном случае имеет вид

$$M_{\mathbf{q}} = i\Xi_c t \sqrt{\frac{\hbar q}{2\rho V s}} \frac{1}{\Delta R^3} (\langle 2| e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} |2\rangle - \langle 1| e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} |1\rangle) = i\Xi_c t \sqrt{\frac{\hbar q}{2\rho V s}} Q(\mathbf{q}, \mathbf{R}), \quad (96)$$

где за $Q(\mathbf{q}, \mathbf{R})$ обозначена зависимость $M(\mathbf{q})$ от структуры состояний (форм-фактор взаимодействия):

$$Q(\mathbf{q}, \mathbf{R}) = \langle 2| e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} |2\rangle - \langle 1| e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} |1\rangle. \quad (97)$$

Подчеркнем, что согласно общей теории прыжкового транспорта достаточно учитывать лишь взаимодействие с фононами на данном центре [24]. Подставляя (96) в (95) и снимая интегрирование по энергии, получим:

$$w \sim \frac{N(\Delta)\Xi_c^2}{\rho\hbar^3 s^4 R^6} \int_0^{2\pi} |Q(\mathbf{q}_0, \mathbf{R})|^2 d\varphi, \quad q_0 = \frac{\Delta}{\hbar s}, \quad (98)$$

где φ – угол между \mathbf{R} и импульсом q_0 фонона, энергия которого соответствует межцентровому энергетическому зазору, а также отбросили численный коэффициент.

Для обратного процесса (с испусканием фонона), в частоте перехода (98), $N(\Delta)$ заменится на $N(\Delta) + 1$:

$$w' \sim \frac{(N(\Delta) + 1)\Xi_c^2}{\rho\hbar^3 s^4 R^6} \int_0^{2\pi} |Q(\mathbf{q}_0, \mathbf{R})|^2 d\varphi. \quad (99)$$

Естественно выделить выделить два процесса: индуцированные (T) и спонтанные (S). Их частоты, соответственно:

$$w_T \sim \frac{N(\Delta)\Xi_c^2}{\rho\hbar^3 s^4 R^6} \langle |Q(\mathbf{q}_0, \mathbf{R})|^2 \rangle, \quad w_S \sim \frac{\Xi_c^2}{\rho\hbar^3 s^4 R^6} \langle |Q(\mathbf{q}_0, \mathbf{R})|^2 \rangle. \quad (100)$$

Здесь введено $\langle |Q(\mathbf{q}_0, \mathbf{R})|^2 \rangle$ - как среднее по углу φ .

Задача нахождения коэффициента диффузия сильно зависит от вида беспорядка и структуры локализованных состояний. Нас в первую очередь интересует зависимость коэффициента диффузии от температуры, поэтому мы проведём здесь лишь качественный анализ, основанный на рассмотрении Мотта прыжков с переменной длиной [24]. Для определения «оптимального» прыжка требуется найти максимум вероятности прыжка между узлами с расстоянием R

$$P(R) \propto \exp\left(-\frac{1}{\pi R^2 g k_B T}\right) \frac{1}{R^6}. \quad (101)$$

³Связь в виде R^{-3} не приводит к делокализации в двумерной модели со случайным беспорядком.

Здесь первый, экспоненциальный, множитель отвечает за вероятность найти состояние в площади πR^2 в полосе энергий $k_B T$, причем g – плотность состояний (число состояний на единицу энергии и площади), а второй, степенной, множитель отвечает за перекрытие волновых функций. Более далекие прыжки выгодны с точки зрения энергии: чем больше R , тем с большей вероятностью найдется почти резонансный узел. Однако, вероятность перейти на такое состояние $\propto |t/R^3|^2$ – спадает с ростом R , см. рис. 8.

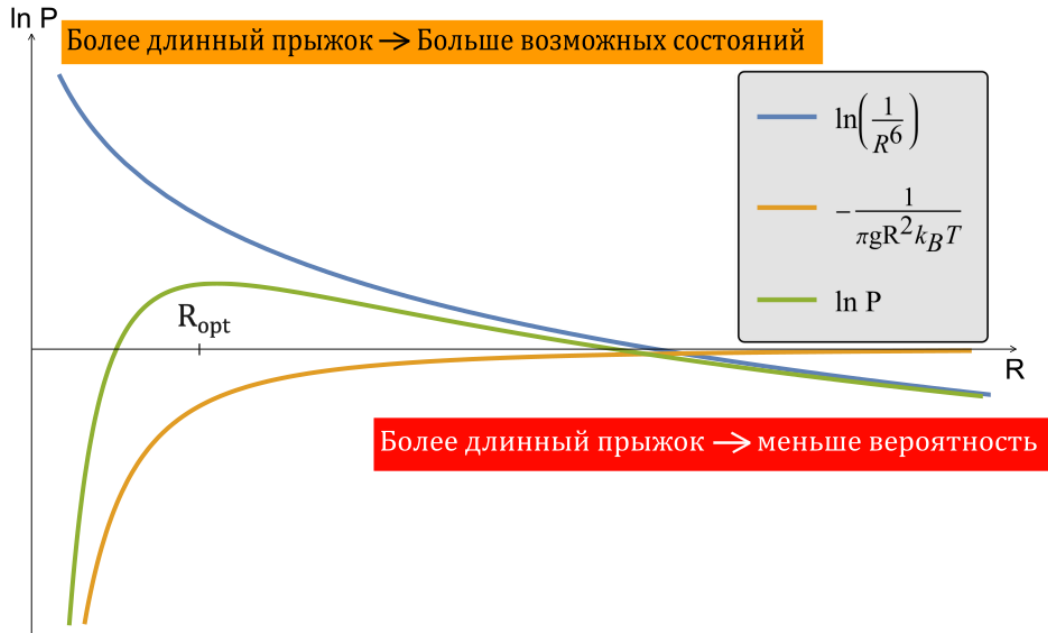


Рис. 8: Анализ вероятности прыжка: при коротких прыжках нет состояний в полосе энергий $k_B T$ (оранжевая линия), вероятность перехода уменьшается с ростом R (синяя линия). Оптимальная длина прыжка R_{opt} соответствует максимуму вероятности (зелёная линия).

Важно подчеркнуть, что в отличие от стандартной задачи о туннелировании, где вероятность перехода экспоненциально спадает с расстоянием, в рассматриваемой нами системе спад определяется лишь степенью R . Оптимизация (101) приводит к оптимальной длине прыжка

$$R_{opt} = \sqrt{\frac{1}{3\pi g k_B T}}, \quad (102)$$

при этом

$$P(R_{opt}) \propto T^3. \quad (103)$$

Можно ожидать, что и коэффициент диффузии

$$D_{hop} \propto R_{opt}^2 P(R_{opt}) w, \quad (104)$$

зависит от температуры **степенным** образом. Данный подход не позволяет определить степень температуры, это задача, требующая отдельного исследования.

5 Заключение

В работе развита модель энергетического спектра и транспорта экситонов, локализованных в узлах муаровой сверхрешетки на основе двумерных полупроводников. Предложен и изучен механизм переноса экситонов между узлами, связанный с наличием у оптически-активных экситонов, «микроскопических» дипольных моментов, осциллирующих на частоте экситонного резонанса ω_0 . Дисперсия экситонов найдена путем решения уравнений Максвелла для электромагнитного поля, порождаемого экситонами, и материального соотношения, связывающего поле на узле и наведенный дипольный момент экситона.

Численные и аналитические расчеты спектра выполнены для треугольной решетки. Были найдены две ветви в энергетическом спектре экситонов. В пределе малых волновых векторов по сравнению с обратным периодом решетки было показано, что одна из них – «поперечная» – является бездисперсионной, а вторая – «продольная» – обладает линейной дисперсией с характерной скоростью порядка 0.01 – 0.1% от скорости света в вакууме. При волновых вектора $k \leq \omega_0/c$ экситоны приобретают за счет смешивания с электромагнитным полем радиационное затухание.

На основе рассчитанного спектра теоретически исследовано распространение экситонов, основное внимание уделялось диффузионному транспорту и, соответственно, расчету коэффициента диффузии D . Температурная зависимость была проанализирована для двух режимов распространения: квазиклассического и прыжкового. Для квазиклассического режима учитывалось рассеяние как на статических точечных дефектах, так и на длинноволновых продольных акустических фононах по механизму деформационного потенциала. В первом случае $D \propto 1/T$, а во втором $D \propto 1/T^2$. В случае прыжкового транспорта благодаря дальнедействующему характеру переноса экситонов между узлами коэффициент диффузии экситонов имеет неэкспоненциальную температурную зависимость: $D \propto T^\eta$, где $\eta > 0$.

Список литературы

1. Twenty years of 2D materials // Nature. — 2024. — Vol. 20. — DOI: <https://doi.org/10.1038/s41567-023-02381-0>. — URL: [10.1038/s41567-023-02381-0](https://doi.org/10.1038/s41567-023-02381-0).
2. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films / K. Novoselov [et al.] // Science. — 2004. — Vol. 336. — DOI: [10.1126/science.1102896](https://doi.org/10.1126/science.1102896). — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1102896>.
3. Two-dimensional atomic crystals / K. S. Novoselov [et al.] // PNAS. — 2005. — Vol. 102, no. 30. — P. 10451–10453. — DOI: [10.1073/pnas.0502848102](https://doi.org/10.1073/pnas.0502848102). — URL: <https://doi.org/10.1073/pnas.0502848102>.
4. Дурнев М. В., Глазов М. М. Экситоны и трионы в двумерных полупроводниках на основе дихалькогенидов переходных металлов // Усп. физ. наук. — 2018. — Т. 188, № 9. — С. 913–934. — DOI: [10.3367/UFNr.2017.07.038172](https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.07.038172). — URL: <https://ufn.ru/ru/articles/2018/9/a/>.
5. Келдыш Л. В. Кулоновское взаимодействие в тонких пленках полупроводников и полуметаллов // Письма в ЖЭТФ. — 1979. — Т. 29, вып. 11. — С. 716. — URL: http://jetpletters.ru/ps/0/article_6696.shtml.
6. Moiré heterostructures as a condensed-matter quantum simulator / D. M. Kennes [et al.] // Nature Physics. — 2021. — Vol. 17. — P. 155–163. — DOI: [10.1038/s41567-020-01154-3](https://doi.org/10.1038/s41567-020-01154-3). — URL: <https://doi.org/10.1038/s41567-020-01154-3>.
7. Bistritzer R., MacDonald A. H. Moire bands in twisted double-layer graphene // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 2011. — July. — Vol. 108, no. 30. — P. 12233–12237. — DOI: [10.1073/pnas.1108174108](https://doi.org/10.1073/pnas.1108174108). — URL: <https://doi.org/10.1073/pnas.1108174108>.
8. Ab initio theory of moiré superlattice bands in layered two-dimensional materials / J. Jung [et al.] // Phys. Rev. B. — 2014. — May. — Vol. 89, issue 20. — P. 205414. — DOI: [10.1103/PhysRevB.89.205414](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.205414). — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.205414>.
9. Tartakovskii A. Excitons in 2D heterostructures // Nature Reviews Physics. — 2020. — Vol. 2, issue 1. — P. 8–9. — DOI: [10.1038/s42254-019-0136-1](https://doi.org/10.1038/s42254-019-0136-1). — URL: <https://doi.org/10.1038/s42254-019-0136-1>.
10. Wu F., Lovorn T., MacDonald A. Topological Exciton Bands in Moiré Heterojunctions. — 2017. — Apr. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.118.147401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.147401). — URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.147401>.
11. Interlayer Exciton Transport in MoSe₂/WSe₂ Heterostructures / Z. Li [et al.] // ACS Nano. — 2021. — Vol. 15, issue 1. — P. 1539–1547. — DOI: [10.1021/acsnano.0c08981](https://doi.org/10.1021/acsnano.0c08981). — URL: <https://doi.org/10.1021/acsnano.0c08981>.
12. Resonantly hybridized excitons in moiré superlattices in van der Waals heterostructures / E. M. Alexeev [et al.] // Nature. — 2019. — Vol. 567, no. 7746. — P. 81–86. — DOI: [10.1038/s41586-019-0986-9](https://doi.org/10.1038/s41586-019-0986-9). — URL: <https://doi.org/10.1038/s41586-019-0986-9>.
13. Observation of moiré excitons in WSe₂/WS₂ heterostructure superlattices / C. Jin [et al.] // Nature. — 2019. — Vol. 567. — P. 76. — DOI: [10.1038/s41586-019-0976-y](https://doi.org/10.1038/s41586-019-0976-y). — URL: <https://doi.org/10.1038/s41586-019-0976-y>.

14. Signatures of moiré-trapped valley excitons in MoSe₂/WSe₂ heterobilayers / K. L. Seyler [et al.] // Nature. — 2019. — Vol. 567. — P. 66. — DOI: [10.1038/s41586-019-0957-1](https://doi.org/10.1038/s41586-019-0957-1). — URL: <https://doi.org/10.1038/s41586-019-0957-1>.
15. Evidence for moiré excitons in van der Waals heterostructures / K. Tran [et al.] // Nature. — 2019. — Vol. 567. — P. 71. — DOI: [10.1038/s41586-019-0975-z](https://doi.org/10.1038/s41586-019-0975-z). — URL: <https://doi.org/10.1038/s41586-019-0975-z>.
16. Cavity-control of interlayer excitons in van der Waals heterostructures / M. Förg [et al.] // Nature Communications. — 2019. — Vol. 10, no. 1. — P. 3697. — DOI: [10.1038/s41467-019-11620-z](https://doi.org/10.1038/s41467-019-11620-z). — URL: <https://doi.org/10.1038/s41467-019-11620-z>.
17. k-p theory for two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors / A. Kormányos [et al.] // 2D Materials. — 2015. — Vol. 2, no. 2. — P. 022001. — DOI: [10.1088/2053-1583/2/2/022001](https://doi.org/10.1088/2053-1583/2/2/022001). — URL: <https://dx.doi.org/10.1088/2053-1583/2/2/022001>.
18. Exciton fine structure and spin decoherence in monolayers of transition metal dichalcogenides / M. M. Glazov [et al.] // Phys. Rev. B. — 2014. — May. — Vol. 89, no. 20. — P. 201302. — ISSN 1550-235X. — DOI: [10.1103/physrevb.89.201302](https://doi.org/10.1103/physrevb.89.201302). — URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.201302>.
19. *Chernikov A., Glazov M. M.* 2D excitonic materials and devices // Semiconductors and Semimetals / ed. by P. B. Deotare, Z. Mi. — Elsevier, 2023. — Chap. Exciton diffusion in 2D van der Waals semiconductors. — ISBN 0080-8784. — DOI: <https://doi.org/10.1016/bs.semsem.2023.09.001>. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0080878423000017>.
20. Interlayer Exciton Transport in MoSe₂/WSe₂ Heterostructures / Z. Li [et al.] // ACS Nano. — 2021. — Jan. — Vol. 15, no. 1. — P. 1539–1547. — DOI: [10.1021/acsnano.0c08981](https://doi.org/10.1021/acsnano.0c08981). — URL: <https://doi.org/10.1021/acsnano.0c08981>.
21. Nonlinear and Negative Effective Diffusivity of Interlayer Excitons in Moiré-Free Heterobilayers / E. Wietek [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2024. — Jan. — Vol. 132, issue 1. — P. 016202. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.132.016202](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.132.016202). — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.132.016202>.
22. Observation of exciton-phonon coupling in MoSe₂ monolayers / S. Shree [et al.] // Phys. Rev. B. — 2018. — July. — Vol. 98, issue 3. — P. 035302. — DOI: [10.1103/PhysRevB.98.035302](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.035302). — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.035302>.
23. *Levitov L. S.* Delocalization of vibrational modes caused by electric dipole interaction // Phys. Rev. Lett. — 1990. — Jan. — Vol. 64, issue 5. — P. 547–550. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.64.547](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.64.547). — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.64.547>.
24. *Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.* Электронные свойства легированных полупроводников. — М. Наука, 1979.
25. Colloquium: Excitons in atomically thin transition metal dichalcogenides / G. Wang [et al.] // Rev. Mod. Phys. — 2018. — Apr. — Vol. 90, issue 2. — P. 021001. — DOI: [10.1103/RevModPhys.90.021001](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.90.021001). — URL: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.90.021001>.