

Московский Физико-Технический Институт
(Государственный Университет)
Институт Теоретической Физики им. Ландау

Теория межподзонных переходов с
переворотом спина в бислоях
дихалькогенидов переходных металлов
(Дипломная работа магистра)

Группа М02-303л
Григорян К.К.
Научный руководитель
д.ф.-м.н., член-корр. РАН Глазов М.М.

Черноголовка 2025

Аннотация

В данной работе показано, что в гетеробислоях дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) квантовые переходы между спиновыми подзонами зоны проводимости могут возбуждаться наряду с магнитным также и электрическим полем электромагнитной волны, т.е. в таких системах возможен электрический дипольный спиновый резонанс. В то же время, в монослоях ДПМ этот эффект запрещён по симметрии. С учетом того, что в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах слои можно разворачивать и сдвигать друг относительно друга, для гетеробислоев возможны различные атомные укладки (stackings или регистры, registry), шесть из которых являются высокосимметричными и активно исследуются. Для всех шести высокосимметричных укладок, включая три укладки Н-типа, где слои развернуты друг по отношению к другу, и три R-типа, где разворота нет, был выполнен симметричный анализ правил отбора для переходов между спиновыми подзонами зоны проводимости. Определены укладки, для которых переходы между спиновыми подзонами возможны за счет переменного электрического поля и установлена поляризация, в которой такой переход возможен. В рамках $k \cdot p$ -метода теории возмущений с учетом спин-орбитального взаимодействия предложена микроскопическая модель электрического дипольного спинового резонанса в гетеробислоях ДПМ.

Оглавление

1	Введение	4
2	Монослои	9
3	Бислои	15
4	Электрический дипольный спиновый резонанс в гетеробислоях	19
4.1	Симметрия монослоя дихалькогенида переходного металла	19
4.2	Симметричный анализ для гетеробислоев	22
4.3	Микроскопическая модель	29
4.4	Гамильтониан Рашбы в гетеробислоях	32
5	Заключение	34

Глава 1

Введение

Дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) являются ван-дер-ваальсовыми полупроводниками.

Изучение монослоев и гетероструктур ДПМ, таких как MoS_2 , и др., представляет значительный интерес для современной физики конденсированного состояния, нанотехнологий и квантовых технологий. ДПМ являются атомарно тонкими материалами с ярко выраженными двумерными свойствами. Это позволяет изучать квантоворазмерные эффекты, а наличие прямой запрещённой зоны в видимом или ближнем инфракрасном диапазоне энергий делает их идеальными для потенциальных приложений в оптоэлектронике (светодиоды, фотодетекторы), фотовольтаике (солнечные элементы) и квантовой эмиссии (источники одиночных фотонов). В ДПМ наблюдается значительное расщепление спиновых подзон за счёт спин-орбитального взаимодействия, что потенциально позволяет управлять спином электронов без внешнего магнитного поля и в будущем реализовывать спиновые транзисторы и другие устройства спинтроники. При этом наличие двух долин в зоне Бриллюэна, которые связаны симметрией к инверсии времени, открывает возможности реализации долинной электроники (valleytronics), где информация кодируется в долинном индексе, и селективного возбуждения носителей заряда светом разной циркулярной поляризации. Наконец, ДПМ открывают широкие возможности для создания гетероструктур на их основе, которые позволяют комбинировать материалы с разными

запрещёнными зонами, создавая гетеропереходы II-типа (с разделением электронов и дырок в пространстве), управлять симметрией системы, а также интегрировать ДПМ с другими двумерными материалами (графеном, нитридом бора) для создания устройств с заданными свойствами.

Элементарная ячейка ДПМ содержит один атом переходного металла и два атома халькогена, из которых формируется гексагональная решетка с группой симметрии D_{3h} , вид сверху на которую показано на рис.1.1a. Обратная решетка также является гексагональной, рис.1.1b. Интерес к себе такие материалы привлекают своими необычными электронными, оптическими и транспортными свойствами, отсутствием центра инверсии и сильными кулоновскими эффектами [1, 2, 3, 4]. Под действием ван-дер-ваальсовых сил на основе монослоев могут формироваться многослойные объемные кристаллы, многие из которых, такие как MoS_2 , $MoSe_2$, WSe_2 и WS_2 , являются непрямозонными полупроводниками (рис.1.2), запрещенная зона которых имеет порядок ~ 1 eV. С уменьшением количества слоев зонная структура систем меняется, в частности, увеличивается ширина запрещенной зоны, которая в монослоях становится прямой и достигает величины ~ 2 eV [5, 6]. Поскольку эффективность кулоновского взаимодействия в двумерных системах больше, чем в трехмерных, энергия связи двумерного экситона в моно- и бислоях ДПМ практически на порядок больше, чем в объемных кристаллах [7]. Не менее интересно и то обстоятельство, что монослои данных веществ являются прямозонными полупроводниками, щель которых формируется в точках K^+ и K^- зон Бриллюэна, причем группа симметрии волнового вектора в этих долинах – C_{3h} [8]. В точках K^+ K^- спиновое вырождение электронных зон снято за счет спин-орбитального взаимодействия. Спиновое расщепление подзон проводимости составляет $\Delta_{SOC}^c \sim 10$ meV, а в валентной зоне $\Delta_{SOC}^v \sim 300$ meV [9]. Симметрия по отношению к инверсии времени (изучаемые материалы не обладают макроскопическим магнитным порядком) приводит к вырождению состояний носителей заряда в разных долинах.

Для небольшой концентрации носителей заряда, которая обыч-

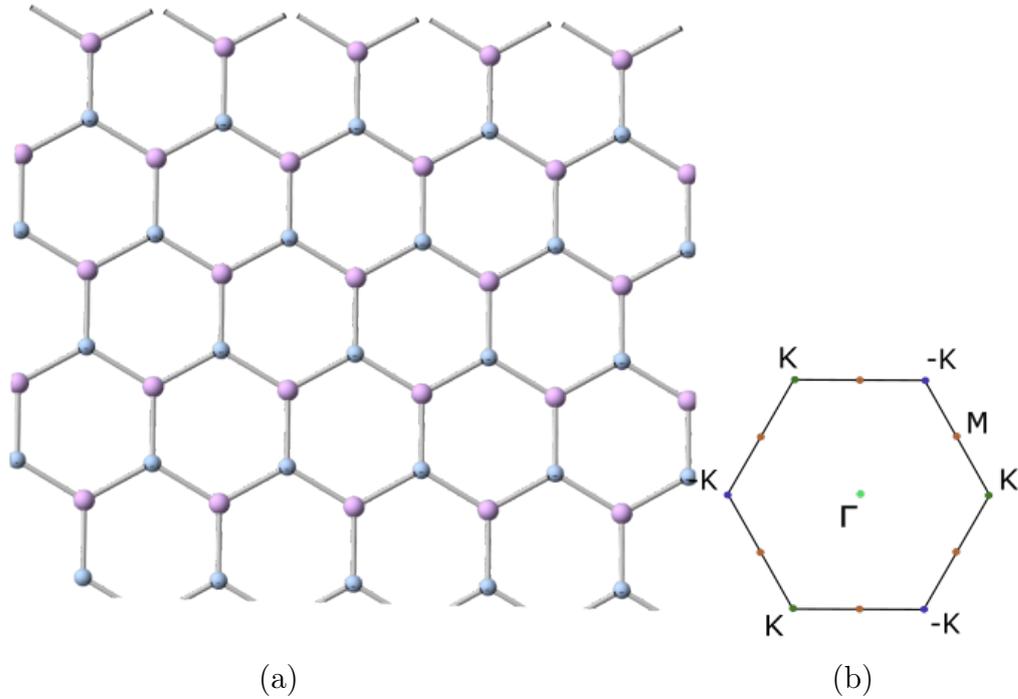


Рис. 1.1: а) Вид сверху на решеточную структуру монослоя ДПМ. Фиолетовые кружки указывают атомы металла, а голубые кружки указывают проекции на плоскость пар атомов халькогена. б) Зона Бриллюэна с указанными высокосимметричными точками.

но и реализуется в экспериментах, достаточно рассмотреть только окрестности K точек. При этом с учетом экситонных эффектов оптические переходы относятся к видимому и ближнему инфракрасному диапазону спектра, а межподзональные переходы в зоне проводимости – к терагерцовому, что делает их особенно интересными [10]. Надо отметить, что междузональные оптические переходы в долинах K^+ и K^- активны в противоположных циркулярных поляризациях [11]. Как будет показано ниже, в монослоях переходы между спиновыми подзонами разрешены только в магнитодипольном приближении, в то время как в гетеробислоях переходы между спиновыми подзонами разрешены и в электрическом дипольном приближении. В

таких системах возможен электрический дипольный спиновый резонанс, предсказанный Э.И. Рашбой для объемных полупроводников и классических структур с квантовыми ямами [12, 13, 14]. Цель нашей работы – развить теорию данного эффекта в гетеробислоях ДПМ.

Гетеробислой, который мы будем изучать в данной работе, состоит из двух монослоев ДПМ WSe_2 и $MoSe_2$, он является структурой 'типа-II': электроны и дырки разделены в пространстве. Полученные результаты, однако, не привязаны к конкретным материалам и применимы для других гетероструктур второго типа. Нашей задачей является изучение правил отбора и микроскопического механизма межподзонных переходов с переворотом спина в гетеробислоях.

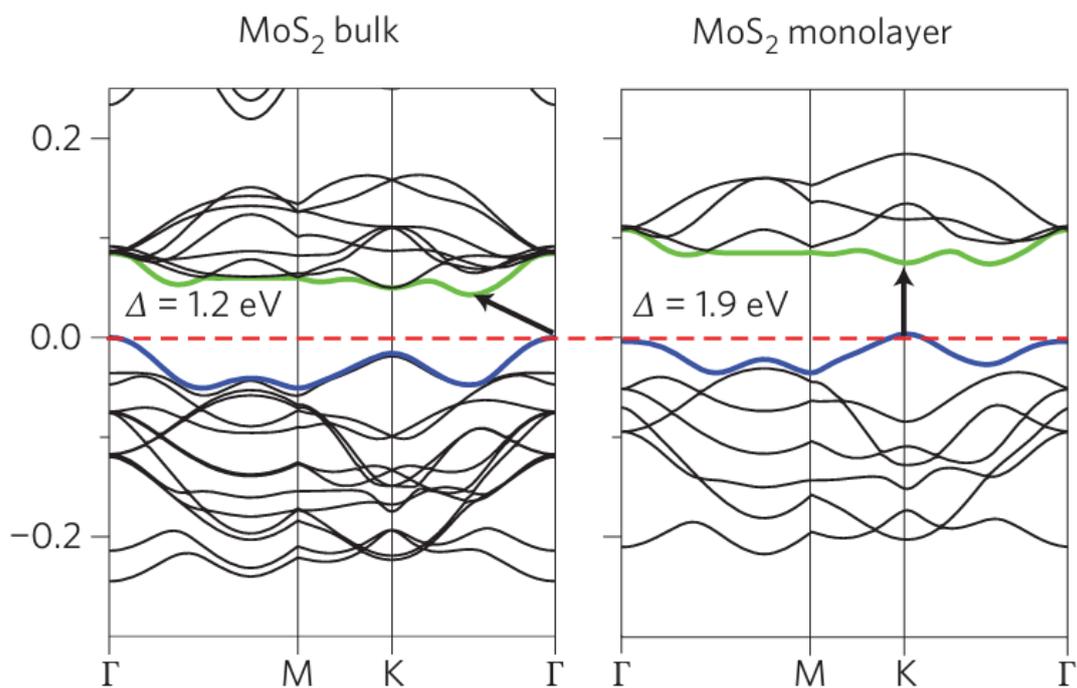


Рис. 1.2: Зонные структуры, рассчитанные с помощью теории функционала плотности (DFT) для объемного и монослоя MoS_2 . Горизонтальные пунктирные линии указывают уровень Ферми. Стрелки указывают запрещенную зону (прямую или непрямую). Выделены верхняя валентная зона (синий) и нижняя зона проводимости (зеленый). Расчет проводился без учета спин-орбитального взаимодействия. Из [6].

Глава 2

Монослои

Гексагональная кристаллическая структура монослоя ДПМ подобна структуре графена, смотреть рис.1.1a, однако симметрия монослоя ДПМ, описываемая точечной группой D_{3h} , ниже, чем симметрия монослоя графена (точечная группа D_{6h}) [15, 16]. Это связано с тем, что в ДПМ атомы, входящие в элементарную ячейку, отличаются по своему химическому составу. В соответствии с этим зонная структура является более сложной, в частности, в спектре открывается энергетическая щель. Также, по сравнению с графеном, сильное спин-орбитальное взаимодействие в образцах приводит к ряду интересных спин-зависимых электронных и оптических свойств [17]. Метод $k \cdot p$ теории возмущений позволяет аналитически изучать зонную структуру в окрестности высокосимметричных точек зоны Бриллюэна, таких как K^+ и K^- , разлагая гамильтониан системы в ряд по малому волновому вектору k , отсчитанному от K^+ или K^- . Этот подход особенно полезен для описания электронных состояний вблизи экстремумов зон. Учет спин-орбитального взаимодействия в рамках $k \cdot p$ метода позволяет предсказывать спиновое расщепление зон и анализировать правила отбора для оптических и спиновых переходов. Кроме того, метод обеспечивает явную связь между симметрией кристалла и параметрами эффективного гамильтониана, что делает его мощным инструментом для моделирования электронных свойств двумерных материалов, таких как дихалькогениды переходных металлов [9].

Анализируя зонную структуру, рассчитанную методом теории функционала плотности в работе [9] и представленную на рис.2.1 можно заметить, что валентная зона имеет максимумы энергии в точках K и Γ , которые являются высокосимметричными точками, имеющими симметрию (группу волнового вектора) C_{3h} и D_{3h} , что означает, что вблизи этих точек дисперсия в параболическом приближении симметричная. Зона проводимости имеет несколько минимумов, главный из которых находится в точке K , а второй, который не сильно отличается от первого по энергии, находится в точке Q , которая должна быть учтена при более детальном рассмотрении; однако она не важна для изучаемых нами эффектов.

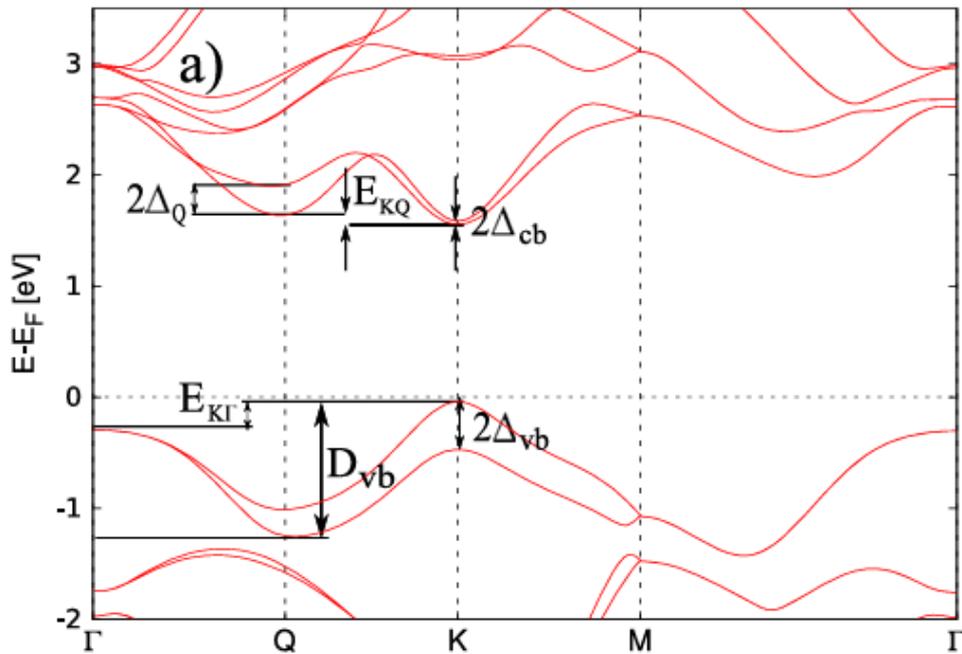


Рис. 2.1: Зонная структура монослоя ДПМ, рассчитанная с помощью теории функционала плотности (DFT). Указаны высокосимметричные точки с энергиями и спиновые расщепления в K точке зоны Бриллюэна. Из [9].

Зонная структура и электронные свойства ДПМ определяются в значительной мере атомарной структурой образца. Как мы уже обсуждали, прямая запрещенная зона в ДПМ находится в высоко-

симметричных точках, долинах K^+ и K^- , которые связаны друг с другом симметрией по отношению к инверсии времени и находятся, соответственно, в противоположных вершинах шестиугольной зоны Бриллюэна, рис.1.1b. Эффективная масса электронов в зоне проводимости и в валентной зоне в этих долинах имеет порядок величины $0.5m_0$, где m_0 масса свободного электрона [18]. Параметры разных монослоев ДПМ сведены в таблице табл. 2.1. Симметрия структуры определяет “киральные” правила отбора при междузонных оптических переходах с сохранением спина: поглощение света σ^+ поляризации возможно в долине K^+ , а σ^- поляризации – в долине K^- .

Как видно из рис.2.1, состояния зоны проводимости и валентной зоны расщеплены по спину в точках K^\pm . Это следствие отсутствия центра инверсии в группе симметрии монослоя и спин-орбитального взаимодействия. Подзоны разных зон описываются разными неприводимыми представлениями группы симметрии C_{3h} . Спиновое расщепление валентной зоны составляет порядка 300 meV, что на порядок больше, чем расщепление зоны проводимости, которое составляет порядка 1 – 10 meV, в то время как сама запрещенная зона имеет порядок 2 eV, рис.2.3 и табл. 2.1. Спин-орбитальное взаимодействие ведет к разности эффективных масс электронов в разных спиновых подзонах. Для разных материалов, как можно увидеть на рис. 2.3, расщепление зон проводимости имеет разные знаки. Это связано с тем, что в блоховские функции проводимости вносят вклад как d -, так и p атомные орбитали рис. 2.2, причем знаки их вкладов в спин-орбитальное взаимодействие различные. Это приводит в структурах MoX_2 (где $X = Se$ или S) к пересечению дисперсионных кривых двух подзон [8, 19].

Наша цель состоит в исследовании правил отбора при межподзонных переходах. Поскольку в долине K^+ (аналогичный анализ можно провести и для долины K^-) состояния зоны проводимости преобразуются по неприводимым представлениям Γ_{11} и Γ_9 точечной группы C_{3h} , а прямое произведение представлений $\Gamma_{11} \times \Gamma_9^* = \Gamma_{11} \times \Gamma_{10} = \Gamma_5$ не содержит представления Γ_2 , Γ_3 или Γ_4 ,¹ по ко-

¹Здесь и далее, если не указано иначе, используются обозначения неприводимых представ-

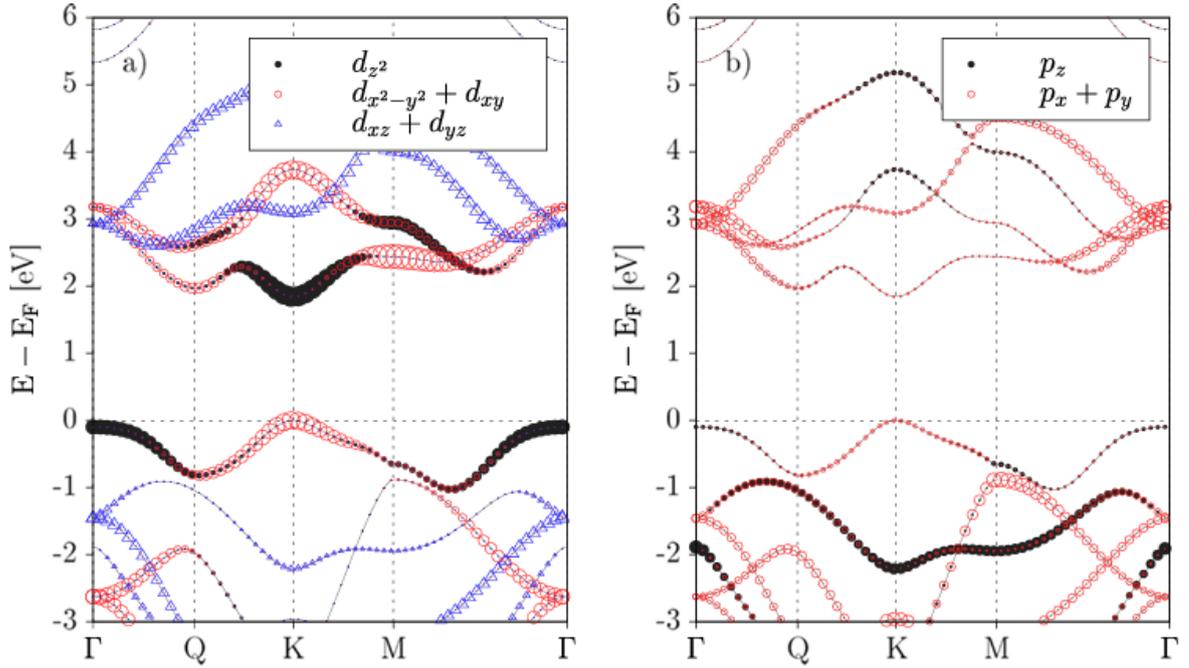


Рис. 2.2: Вклады атомных орбиталей в энергетических зонах MX_2 . (a) d-орбитали атома металла и (b) p-орбитали атомов халькогена. Размер каждого символа пропорционален весу атомной орбитали. В этих расчетах спин-орбитального взаимодействие не учитывалось. Из [9]

тому преобразуются компоненты вектора, то в монослоях переходы между спиновыми подзонами разрешены только в магнитодипольном приближении. По тем же соображениям в электрическом дипольном приближении запрещены и переходы между спиновыми подзонами валентной зоны. Соответственно, спиновый резонанс в монослоях дихалькогенидов переходных металлов может возбуждаться лишь магнитной составляющей электромагнитной волны, несмотря на отсутствие центра инверсии в группе симметрии системы.

В данной работе мы будем пренебрегать влиянием подложки на систему для упрощения модели. Но надо отметить, что её присутствие может изменить электронные, оптические и симметричные свой-

лений, введенные в книге [20].

Материал	a_0 (Å)	E_g (eV)	Δ_{SO}^v (meV)	Δ_{SO}^c (meV)	m^*/m_0
MoS_2	3.16	1.8–2.0	150–200	3–5	0.5 (e), 0.6 (h)
$MoSe_2$	3.29	1.5–1.6	180–200	10–20	0.5 (e), 0.6 (h)
WS_2	3.15	1.8–2.0	400–450	20–30	0.4 (e), 0.5 (h)
WSe_2	3.28	1.6–1.7	450–500	30–50	0.4 (e), 0.5 (h)

Таблица 2.1: Параметры разных монослоев дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ): a_0 — постоянная решётки, E_g — ширина запрещённой зоны, Δ_{SO}^v и Δ_{SO}^c — спин-орбитальное расщепление валентной зоны и зоны проводимости соответственно, m^*/m_0 — эффективная масса (e — электроны, h — дырки). Из [8, 9, 18]

ства ДПМ в силу её взаимодействия с монослоем. Один из эффектов, связанных с наличием подложки, является нарушение симметрии. Например, если подложка имеет кубическую симметрию, то исходная группа симметрии D_{3h} монослоя ДПМ может снижаться до C_{3v} , что влияет на правила отбора оптических и спиновых переходов. Состояния в подложке могут смешиваться с состояниями системы, что может сильно повлиять на зонную структуру монослоя. С другой стороны, различие постоянных решеток подложки и монослоя ДПМ приводит к растяжению или сжатию системы, что уже влияет на изменение запрещенной зоны, спин-орбитального взаимодействия. На экситоны подложка может влиять ещё посредством экранирования кулоновского взаимодействия, что уменьшает энергию связи экситона. [21]

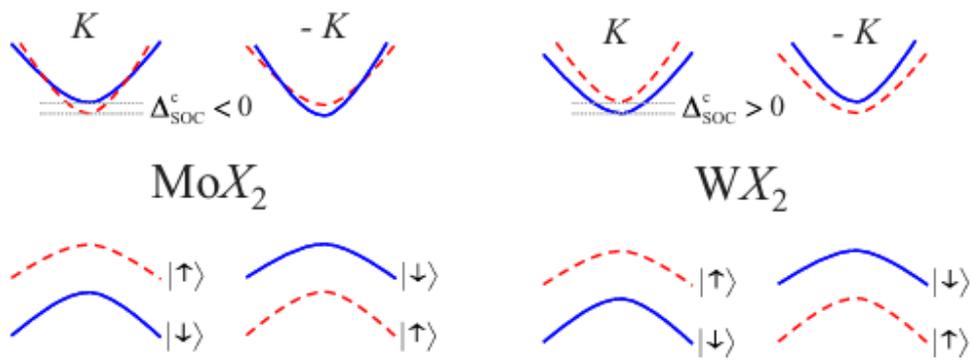


Рис. 2.3: Схематическая иллюстрация зонных структур MoX_2 и WX_2 , где красные штриховые линии обозначают спиновые подзоны со спином вверх, а синие линии подзоны со спином вниз. Видно, что спин-орбитальные расщепления зон проводимости имеют разные знаки. Из [22]

Глава 3

Бислои

В двуслойных структурах появляется новая специфика. Во-первых, электроны и дырки могут туннелировать между слоями. Наиболее ярко этот эффект проявляется в гетеробислоях MoX_2/WY_2 ($X, Y = Se$ или Te), где реализуется тип-II зонной структуры: дно зоны проводимости оказывается в слоях на основе молибдена, а потолок валентной зоны в слоях на основе вольфрама [23, 24]. Это приводит к пространственному разделению носителей заряда и ряду новых эффектов, которые широко изучаются теоретически и экспериментально. Среди всевозможных гетеробислоев, параметры которых указаны в таблице 3.1 структура $MoSe_2/WSe_2$, представленная на рис. 3.1, имеет высокую стабильность и минимальное рассогласование решёток, что делает её хорошим объектом для исследований.

Во-вторых, наличие второго слоя в гетероструктуре даёт возможность развернуть слои по-разному друг относительно друга. Существует 6 возможных высокосимметричных укладок (registry, stacking), которые в свою очередь делятся на 2 типа: *H*-тип: AA' , $A'B$, AB , где слои развернуты друг относительно друга на 180 градусов, и *R*-тип: AA , AB' , $A'B'$, где нет разворота слоев друг относительно друга [26, 27]. Различные укладки представлены на рис. 3.2.

Система	δa (%)	d (Å)	E (эВ)	τ (нс)	Тип
MoSe ₂ /WSe ₂	<0.2	6.5	1.2-1.4	10-100	II
MoS ₂ /WS ₂	0.3	6.3	1.5-1.7	5-50	II
MoTe ₂ /WSe ₂	1.1	6.7	0.9-1.1	1-10	II
WS ₂ /WSe ₂	0.4	6.6	1.4-1.6	20-80	I
MoS ₂ /MoSe ₂	0.8	6.4	1.6-1.8	2-20	I
WSe ₂ /MoS ₂	0.9	6.5	1.1-1.3	5-30	II

Таблица 3.1: Параметры гетеробислоев для различных систем ДПМ: δa – рассогласование решёток, d (Å) – межслоевое расстояние, E – энергия межслоевого экситона, τ – время жизни экситона и тип зонного выравнивания [23, 25]

Для сравнения ключевых параметров различных укладок в таблице 3.2 приведены данные о спин-орбитальном расщеплении и резонансных частотах межподзонных переходов. Как видно, укладки N-типа обладают более выраженными спиновыми эффектами из-за нарушения инверсионной симметрии.

Укладка	Тип	Δ_{SO}^c (мэВ)	$E_{\text{рез}}$ (ТГц)
AB	N	10–15	0.3–0.8
AA'	N	15–20	0.5–1.0
A'B	N	12–18	0.4–0.9
AA	R	8–12	0.2–0.6
AB'	R	5–10	0.1–0.5
A'B'	R	6–11	0.2–0.7

Таблица 3.2: Сравнение параметров высокосимметричных укладок гетеробислоев ДПМ. Δ_{SO}^c – спин-орбитальное расщепление зоны проводимости, $E_{\text{рез}}$ – частота резонанса для межподзонных переходов. [16, 28, 9]

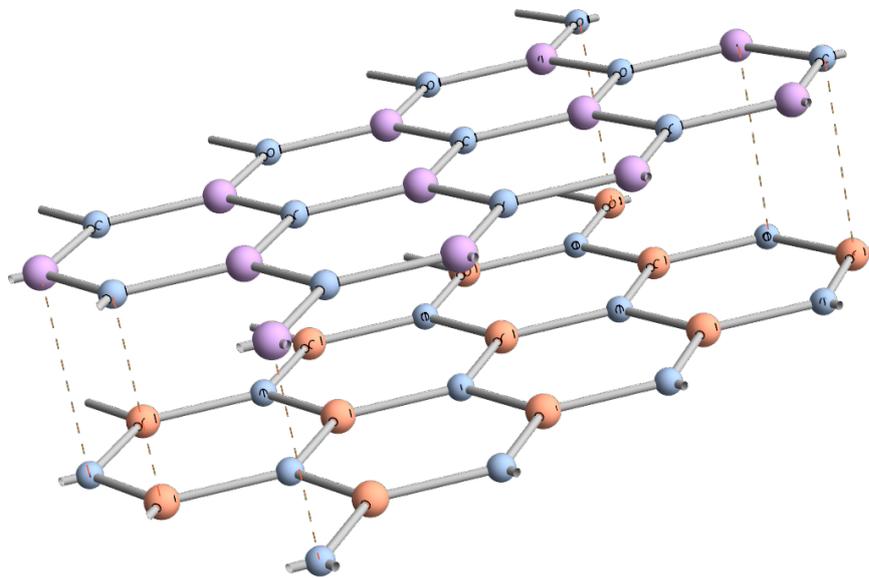


Рис. 3.1: Схематическая иллюстрация двух слоев бислоя в укладке AA' , где синие шарики характеризуют атомы халькогена Se , а оранжевые и фиолетовые соответственно W и Mo .

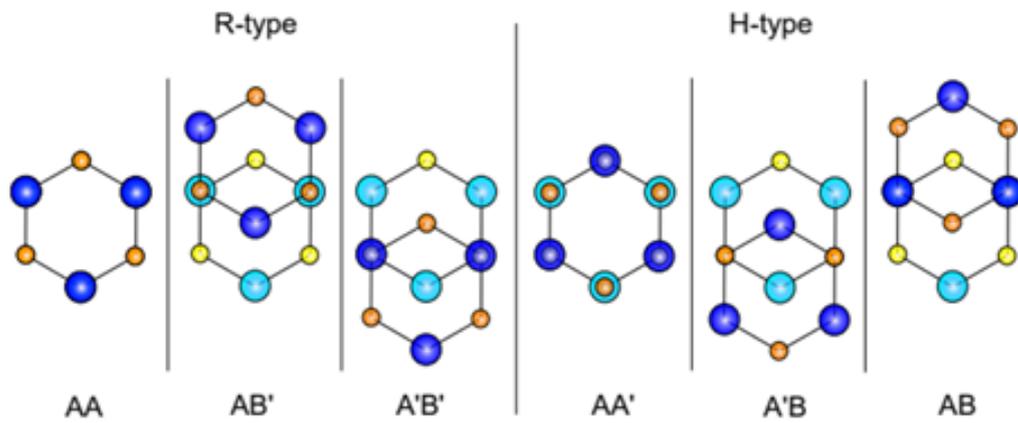


Рис. 3.2: Разные возможные высокосимметричные укладки двух монослоев. В укладках типа H слои развернуты относительно друг друга, а в укладках R -типа разворотов нет. Из [22].

Глава 4

Электрический дипольный спиновый резонанс в гетеробислоях

4.1 Симметрия монослоя дихалькогенида переходного металла

Решетка в реальном пространстве для монослоя кристалла дихалькогенида переходного металла показана на рис. 4.1. Желтые и синие круги обозначают позиции атомов халькогена и металла соответственно.

Для описания правил преобразования волновых функций мы следуем [20] и (используя $\cos 2\pi/3 = -1/2$) определяем действие вращения C_3 (на угол $+2\pi/3$ вокруг положительной оси z , т.е. центра шестиугольника, ось x вращается в направлении положительной оси y) как:

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow D_{C_3}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}') = \psi(\hat{C}_3^{-1}\mathbf{r}), \quad \hat{C}_3^{-1} = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

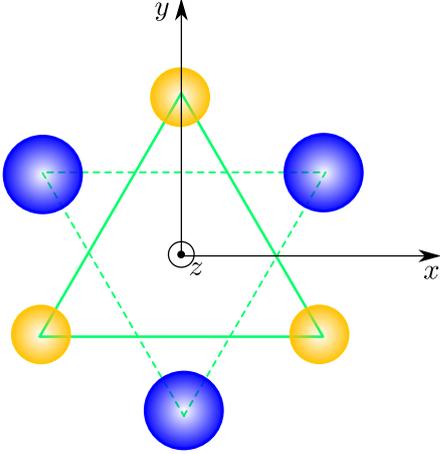


Рис. 4.1: Позиции атомов в решетке монослоя дихалькогенида переходного металла. Синие и желтые круги обозначают позиции атомов металла и халькогена соответственно.

или

$$x' = -\frac{x}{2} - \frac{\sqrt{3}y}{2}, \quad y' = -\frac{y}{2} + \frac{\sqrt{3}x}{2}.$$

Здесь оператор \hat{C}_3 — это преобразование координат, D_{C_3} — преобразование функции. В результате получаем:

$$D_{C_3}(x + iy) = e^{i\frac{2\pi}{3}}(x + iy), \quad D_{C_3}(x - iy) = e^{-i\frac{2\pi}{3}}(x - iy), \quad (4.2)$$

$$D_{C_3}(x - iy)^2 = e^{i\frac{2\pi}{3}}(x - iy)^2, \quad D_{C_3}(x + iy)^2 = e^{-i\frac{2\pi}{3}}(x + iy)^2, \quad (4.3)$$

что полностью согласуется с таблицей характеров для точечной группы C_{3h} [20].

Положения атомов металла, \mathbf{R}_M , и халькогена, \mathbf{R}_X , в элементарной ячейке (спроецированные на плоскость монослоя) задаются как:

$$\mathbf{R}_M = \frac{a_0}{2}(1, 1/\sqrt{3}), \quad \mathbf{R}_X = \frac{a_0}{2}(1, -1/\sqrt{3}), \quad (4.4)$$

где a_0 — постоянная решётки (см. рис. 4.1). Волновые векторы долин \mathbf{K}_\pm задаются как:

$$\mathbf{K}_\pm = \frac{2\pi}{a_0}(\pm 2/3, 0). \quad (4.5)$$

Таким образом, правила преобразования для факторов Блоха $\exp\{i\mathbf{K}_{\pm}\mathbf{R}_{M,X}\}$ имеют вид:

$$D_{C_3} \exp\{i\mathbf{K}_{\pm}R_M\} = e^{\pm i\frac{2\pi}{3}} \exp\{i\mathbf{K}_{\pm}R_M\}, \quad (4.6)$$

$$D_{C_3} \exp\{i\mathbf{K}_{\pm}R_X\} = e^{\mp i\frac{2\pi}{3}} \exp\{i\mathbf{K}_{\pm}R_X\}. \quad (4.7)$$

долина	зона	(а) шестиугольник	(b) металл	(с) халькоген
\mathbf{K}_+	валентная	Γ_1	Γ_3	Γ_2
	проводимости	Γ_2	Γ_1	Γ_3
\mathbf{K}_-	валентная	Γ_1	Γ_2	Γ_3
	проводимости	Γ_3	Γ_1	Γ_2
\mathbf{K}_+	валентная \uparrow	Γ_7	Γ_{10}	Γ_{11}
	проводимости \uparrow	Γ_{11}	Γ_7	Γ_{10}
	проводимости \downarrow	Γ_9	Γ_8	Γ_{12}
\mathbf{K}_-	валентная \downarrow	Γ_8	Γ_9	Γ_{12}
	проводимости \downarrow	Γ_{12}	Γ_8	Γ_9
	проводимости \uparrow	Γ_{10}	Γ_7	Γ_{11}

Таблица 4.1: Соответствие между представлениями точечных групп C_{3h} , актуальными для \mathbf{K}_{\pm} в монослое ДПМ. Приведены как векторные, так и спинорные представления, \uparrow и \downarrow обозначают состояния со спином вверх $|1/2, +1/2\rangle$ и спином вниз $|1/2, -1/2\rangle$. Актуальны только верхние валентные зоны (\uparrow в долине \mathbf{K}_+ и \downarrow в долине \mathbf{K}_-).

Известно, что блоховские функции валентной зоны в долинах \mathbf{K}_{\pm} инвариантны, если центр точечных преобразований совпадает с центром шестиугольника, как на рис. 4.1 [29, 9]. Следовательно, в долине \mathbf{K}_+ атомная орбиталь металла (без фактора Блоха) валентной зоны преобразуется как функция с компонентой углового момента $+2$, а в долине \mathbf{K}_- — как функция с компонентой углового момента -2 . Соответствие между представлениями точечной группы C_{3h} для разных начал координат (актуальных для одной долины монослоя ДПМ) приведено в табл. 4.1. Для простоты мы обозначаем представления как Γ_n (а не K_n), где $n = 1 \dots 12$, несмотря на то, что эти состояния относятся к K -точкам зоны Бриллюэна.

4.2 Симметричный анализ для гетеробислоев

Проанализируем зонную структуру и правила отбора в гетеробислоях с использованием теории представлений групп. На рис. 4.2 схематически представлена зонная структура для шести укладок гетеробислоев. Показаны состояния в одной долине, которая соответствует (для H -типа) долине K^+ в слое MoX_2 и долине K^- в слое WY_2 . В случае укладки R -типа долины в слоях на основе молибдена и вольфрама совпадают. Для валентной зоны v показана только наивысшая по энергии подзона (спин-орбитальное расщепление состояний валентной зоны составляет сотни мэВ и вторая спиновая подзона в рассматриваемых эффектах роли не играет). Для зоны проводимости представлены две нижние по энергии подзоны основной зоны проводимости s , а также еще два состояния той же симметрии, связанные с ближайшей возбужденной зоной проводимости $s + 1$ и следующей зоной проводимости $s + 2$, которые важны для микроскопического описания эффекта. По отношению к отражению в горизонтальной плоскости симметрии уединенного монослоя состояния v , s и $s + 2$ не меняют знак, в то время как состояния зоны $s + 1$ знак меняют [10, 28].

Покажем, как проводился симметричный анализ на примере укладки AA' . Эта укладка обладает типом H , она описывается точечной группой C_{3v} , причем центр точечных преобразований можно выбрать в центре шестиугольника. Это позволяет согласовать преобразования симметрии верхнего и нижнего слоев. Зная центр точечных преобразований, мы можем определить, по какому неприводимому представлению группы волнового вектора преобразуются волновые функции соответствующих зон (табл. 4.2). С учетом того, что симметрия точки K^+ и K^- описывается группой C_3 , мы устанавливаем, что орбитальные блоховские функции дна зоны проводимости s в точке K^+ преобразуются по неприводимому (векторному) представлению Γ_2 , вершины валентной зоны v по представлению Γ_1 , а ближайшая возбужденная зона проводимости $s + 1$ преобразуется

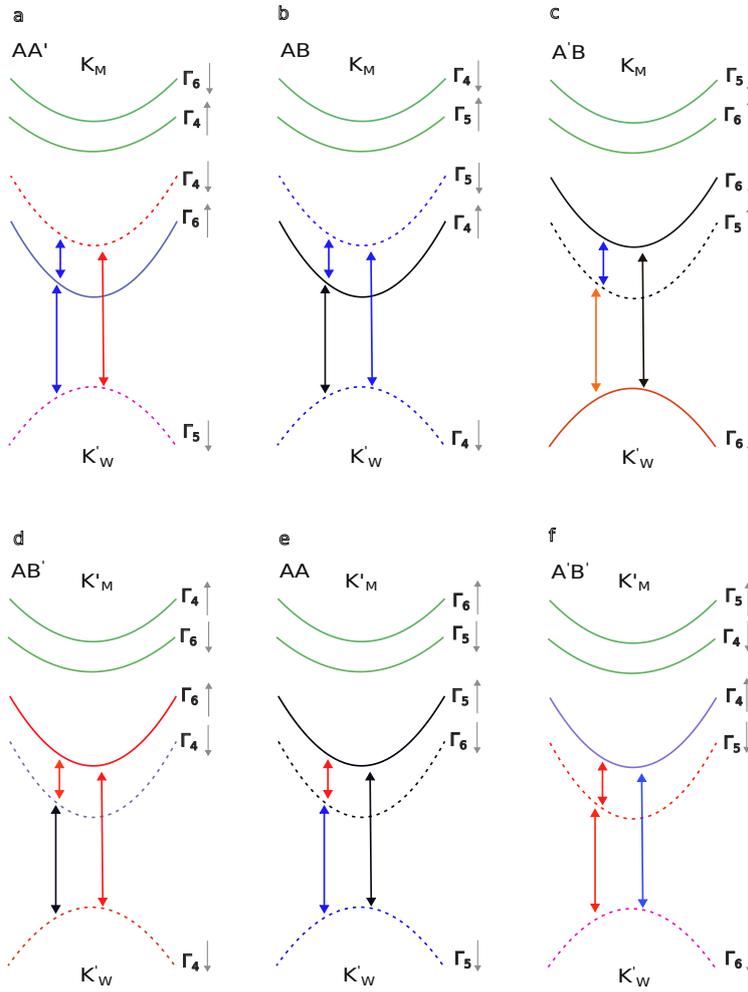


Рис. 4.2: Зонная структура в одной из долин для всех шести высоко-симметричных укладок. Показаны верхняя подзона валентной зоны v , а также две спиновые подзоны зоны проводимости c и спиновые подзоны $c + 1$ и $c + 2$, имеющие ту же самую симметрию (две другие спиновые подзоны не приведены, чтобы не загромождать рисунок). Расщепления показаны не в масштабе. Красные стрелки показывают переходы в σ^+ поляризации, синие – в σ^- (электрическое поле волны лежит в плоскости монослоя). Черные стрелки показывают переходы в z поляризации (электрическое поле поляризовано по нормали к монослою).

n	γ_{σ_h}	$\gamma_{C_3}^M$	$\gamma_{C_3}^X$	$\gamma_{C_3}^h$
$c+3$	-1	ω^*	1	ω
$c+2$	+1	ω^*	1	ω
$c+1$	-1	ω	ω^*	1
c	+1	1	ω	ω^*
v	+1	ω	ω^*	1
$v-1$	-1	ω^*	1	ω
$v-2$	-1	1	ω	ω^*
$v-3$	+1	ω^*	1	ω
$v-4$	+1	ω	ω^*	1

Таблица 4.2: Симметрия состояний Блоха ψ_n в точке K в монослоях ДПМ. $\omega = e^{i\frac{2\pi}{3}}$, γ_{σ_h} – четность при зеркальном отражении σ_n , γ_{C_3} собственное значение C_3 , а M, X, h центры точечных преобразований: атом металла, атом халькогена и центр шестиугольника. Из [30]

согласно Γ_1 . С учетом того, что спиноры \uparrow и \downarrow преобразуются по Γ_4 и Γ_5 , соответственно, и воспользовавшись таблицей умножения представлений [22, 20]

$$\Gamma_5 \times \Gamma_4^* = \Gamma_5 \times \Gamma_5 = \Gamma_3, \quad (4.8a)$$

$$\Gamma_4 \times \Gamma_5^* = \Gamma_4 \times \Gamma_4 = \Gamma_2, \quad (4.8b)$$

$$\Gamma_5 \times \Gamma_5^* = \Gamma_4 \times \Gamma_4^* = \Gamma_4 \times \Gamma_5 = \Gamma_1, \quad (4.8c)$$

$$\Gamma_6 \times \Gamma_5^* = \Gamma_6 \times \Gamma_4 = \Gamma_3, \quad (4.8d)$$

$$\Gamma_6 \times \Gamma_4^* = \Gamma_6 \times \Gamma_5 = \Gamma_2, \quad (4.8e)$$

$$\Gamma_3 \times \Gamma_5 = \Gamma_2 \times \Gamma_4 = \Gamma_6, \quad (4.8f)$$

$$\Gamma_3 \times \Gamma_4 = \Gamma_2 \times \Gamma_6 = \Gamma_5, \quad (4.8g)$$

$$\Gamma_2 \times \Gamma_5 = \Gamma_3 \times \Gamma_6 = \Gamma_4, \quad (4.8h)$$

получаем неприводимые представления группы C_3 , описывающие

Укладка	$c_{\downarrow}/c_{\uparrow}$	$(c+1)_{\downarrow}/(c+1)_{\uparrow}$	$(c+2)_{\downarrow}/(c+2)_{\uparrow}$	$v_{\downarrow}/v_{\uparrow}$
AB	Γ_5/Γ_4	Γ_6/Γ_5	Γ_4/Γ_6	Γ_4/Γ_6
AA'	Γ_4/Γ_6	Γ_5/Γ_4	Γ_6/Γ_5	Γ_5/Γ_4
$A'B$	Γ_6/Γ_5	Γ_4/Γ_6	Γ_5/Γ_4	Γ_6/Γ_5
AA'	Γ_6/Γ_5	Γ_5/Γ_4	Γ_4/Γ_6	Γ_5/Γ_4
AB'	Γ_4/Γ_6	Γ_6/Γ_5	Γ_5/Γ_4	Γ_4/Γ_6
$A'B'$	Γ_5/Γ_4	Γ_4/Γ_6	Γ_6/Γ_5	Γ_6/Γ_4

Таблица 4.3: Таблица симметрий спиновых подзон нижних трех зон проводимости и верхней валентной зоны.

интересующие нас состояния:

$$v = \begin{cases} v_{\downarrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_5 = \Gamma_5, \\ v_{\uparrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_4 = \Gamma_4, \end{cases} \quad (4.9a)$$

$$c = \begin{cases} c_{\downarrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_5 = \Gamma_4, \\ c_{\uparrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_4 = \Gamma_6, \end{cases} \quad (4.9b)$$

$$c+1 = \begin{cases} (c+1)_{\downarrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_5 = \Gamma_5, \\ (c+1)_{\uparrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_4 = \Gamma_4, \end{cases} \quad (4.9c)$$

$$c+2 = \begin{cases} (c+2)_{\downarrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_5 = \Gamma_6, \\ (c+2)_{\uparrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_4 = \Gamma_5. \end{cases} \quad (4.9d)$$

Эти представления подписаны у соответствующих зон на рис. 4.2, а также сведены в таблицу 4.3.

Таким же образом можно анализировать остальные укладки. Приведем лишь основные результаты. Укладка AB принадлежит H -типу, в качестве центра точечных преобразований выберем атом ме-

талла. При этом

$$c = \begin{cases} c_{\downarrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_5 = \Gamma_5, \\ c_{\uparrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_4 = \Gamma_4, \end{cases} \quad (4.10a)$$

$$c + 1 = \begin{cases} (c + 1)_{\downarrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_5 = \Gamma_6, \\ (c + 1)_{\uparrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_4 = \Gamma_5, \end{cases} \quad (4.10b)$$

$$c + 2 = \begin{cases} (c + 2)_{\downarrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_5 = \Gamma_4, \\ (c + 2)_{\uparrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_4 = \Gamma_6, \end{cases} \quad (4.10c)$$

$$v = \begin{cases} v_{\downarrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_5 = \Gamma_6, \\ v_{\uparrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_4 = \Gamma_5. \end{cases} \quad (4.10d)$$

Укладка $A'B$ относится к H -типу, центр точечных преобразований – атом халькогена:

$$c = \begin{cases} c_{\downarrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_5 = \Gamma_6, \\ c_{\uparrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_4 = \Gamma_5, \end{cases} \quad (4.11a)$$

$$c + 1 = \begin{cases} (c + 1)_{\downarrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_5 = \Gamma_4, \\ (c + 1)_{\uparrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_4 = \Gamma_6, \end{cases} \quad (4.11b)$$

$$c + 2 = \begin{cases} (c + 2)_{\downarrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_5 = \Gamma_5, \\ (c + 2)_{\uparrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_4 = \Gamma_4, \end{cases} \quad (4.11c)$$

$$v = \begin{cases} v_{\downarrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_5 = \Gamma_6, \\ v_{\uparrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_4 = \Gamma_5. \end{cases} \quad (4.11d)$$

Укладка AA относится к типу R , центр точечных преобразований для нее – центр шестиугольника. Неприводимые представления, по которым преобразуются соответствующие блоховские функции, та-

КОВЫ.

$$c = \begin{cases} c_{\downarrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_5 = \Gamma_6, \\ c_{\uparrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_4 = \Gamma_5, \end{cases} \quad (4.12a)$$

$$c + 1 = \begin{cases} (c + 1)_{\downarrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_5 = \Gamma_5, \\ (c + 1)_{\uparrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_4 = \Gamma_4, \end{cases} \quad (4.12b)$$

$$c + 2 = \begin{cases} (c + 2)_{\downarrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_5 = \Gamma_4, \\ (c + 2)_{\uparrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_4 = \Gamma_6, \end{cases} \quad (4.12c)$$

$$v = \begin{cases} v_{\downarrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_5 = \Gamma_5, \\ v_{\uparrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_4 = \Gamma_4. \end{cases} \quad (4.12d)$$

Для укладки AB' , которая относится к R -типу, центром точечных преобразований является атом металла в слое WY_2 и атом халькогена в слое MoX_2 . Это приводит к тому, что

$$c = \begin{cases} c_{\downarrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_5 = \Gamma_4, \\ c_{\uparrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_4 = \Gamma_6, \end{cases} \quad (4.13a)$$

$$c + 1 = \begin{cases} (c + 1)_{\downarrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_5 = \Gamma_6, \\ (c + 1)_{\uparrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_4 = \Gamma_5, \end{cases} \quad (4.13b)$$

$$c + 2 = \begin{cases} (c + 2)_{\downarrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_5 = \Gamma_5, \\ (c + 2)_{\uparrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_4 = \Gamma_4, \end{cases} \quad (4.13c)$$

$$v = \begin{cases} v_{\downarrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_5 = \Gamma_4, \\ v_{\uparrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_4 = \Gamma_6. \end{cases} \quad (4.13d)$$

Наконец, укладка $A'B'$ принадлежит R -типу, но для нее центром точечных преобразований является атом халькогена в слое WY_2 и атом металла в слое MoX_2 , поэтому в отличие от случая AB' имеем:

$$c = \begin{cases} c_{\downarrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_5 = \Gamma_5, \\ c_{\uparrow} = \Gamma_1 \times \Gamma_4 = \Gamma_4, \end{cases} \quad (4.14a)$$

$$c + 1 = \begin{cases} (c + 1)_{\downarrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_5 = \Gamma_4, \\ (c + 1)_{\uparrow} = \Gamma_2 \times \Gamma_4 = \Gamma_6, \end{cases} \quad (4.14b)$$

$$c + 2 = \begin{cases} (c + 2)_{\downarrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_5 = \Gamma_6, \\ (c + 2)_{\uparrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_4 = \Gamma_5, \end{cases} \quad (4.14c)$$

$$v = \begin{cases} v_{\downarrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_5 = \Gamma_6, \\ v_{\uparrow} = \Gamma_3 \times \Gamma_4 = \Gamma_5. \end{cases} \quad (4.14d)$$

Зная представления, по которым преобразуются блоховские функции в точке K^+ (K^-), можно определить правила отбора при переходах между соответствующими зонами или подзонами. Для этого следует учесть [20], что в группе волнового вектора C_3 комбинация компонент электрического или магнитного поля, соответствующая одной циркулярной поляризации σ^+ ($E_x + iE_y$ или $B_x + iB_y$) преобразуется по представлению Γ_2 , а для противоположной циркулярной поляризации σ^- ($E_x - iE_y$ или $B_x - iB_y$) – по Γ_3 . Здесь, как и раньше, оси x, y лежат в плоскости гетеробислоя, z – нормаль. Из того, что компоненты электрического и магнитного поля преобразуются по эквивалентным неприводимым представлениям группы C_3 , мы видим, что разрешенные магнитодипольные переходы возможны и в электрическом дипольном приближении. Воспользовавшись таблицей умножения 4.8 получаем правила отбора. Они показаны стрелками разного цвета на рис. 4.2. Правила отбора при междузонных переходах соответствуют известным из литературы [22, 25]. Новым результатом тут являются правила отбора для переходов между спиновыми подзонами зоны проводимости. В частности, для всех высокосимметричных укладок переходы между подзонами зоны проводимости c возможны в электрическом дипольном приближении в поляризации σ^+ или σ^- в зависимости от типа укладки.

Приведем для полноты изложения упрощенный анализ правил

отбора, основанный на следующих соображениях. Группа C_3 не различает одинаковые компоненты вектора (электрического поля) и псевдовектора (магнитного поля). Поэтому спиновый переход, разрешенный в магнитодипольном приближении в заданной поляризации, например, $\uparrow \rightarrow \downarrow$ в поляризации σ^- , разрешен в той же поляризации и в электрическом дипольном приближении. Более того, в группе C_3 угловой момент сохраняется по модулю 3, поэтому, зная правила отбора при междзонных переходах, можно определить и правила отбора при межподзонных переходах, пользуясь следующими соотношениями $\sigma^+ + \sigma^+ = \sigma^-$, $\sigma^- + \sigma^- = \sigma^+$, $\sigma^\pm + z = \sigma^\pm$.

4.3 Микроскопическая модель

Таким образом, симметричный анализ показывает возможность междзонного электрического дипольного спинового резонанса в гетеробислоях дихалькогенидов переходных металлов. Приведем теперь иллюстративную микроскопическую модель эффекта. Как и раньше, мы подробно рассмотрим укладку AA' , модель для других укладок вполне аналогична. В отсутствие взаимодействия между слоями и спин-орбитального смешивания состояния зоны проводимости Γ_6 и Γ_4 в точке K можно записать в следующем виде [9, 16]

$$|\Gamma_6\rangle = -\frac{\mathcal{X} + i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}} \uparrow, \quad |\Gamma_4\rangle = -\frac{\mathcal{X} + i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}} \downarrow. \quad (4.15)$$

Здесь каллиграфическими буквами \mathcal{X} , \mathcal{Y} , \mathcal{Z} обозначаются орбитальные блоховские функции, которые преобразуются как соответствующие координаты, \uparrow и \downarrow , как и выше, обозначают базисные спиновые столбцы. Знак “ $-$ ” выбран для соответствия каноническому базису. Из формулы (4.15) видно, что переходы между состояниями Γ_6 и Γ_4 возможны только в магнитодипольном приближении за счет взаимодействия

$$\mathcal{H}_B = \frac{1}{2}g\mu_B(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}), \quad (4.16)$$

где $\mathbf{B} = (B_x, B_y)$ – компоненты в плоскости магнитного поля падающей электромагнитной волны, μ_B – магнетон Бора, а g – g -фактор электрона (для поля в плоскости он близок к 2 [31]).

В гетеробислое с учетом спин-орбитального взаимодействия состояния электронов (4.15) модифицируются за счет смешивания с состояниями той же симметрии, но происходящими от других зон:

$$|\Gamma_4\rangle = -\beta \frac{\mathcal{X} + i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}} \downarrow + \underbrace{\alpha \mathcal{Z}}_{c+1} \uparrow, \quad (4.17a)$$

$$|\Gamma_6\rangle = -\beta' \frac{\mathcal{X} + i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}} \uparrow + \underbrace{\alpha' \frac{\mathcal{X}' - i\mathcal{Y}'}{\sqrt{2}}}_{c+2} \downarrow. \quad (4.17b)$$

Коэффициенты $\alpha, \beta, \alpha', \beta'$, описывающие смешивание состояний, подчиняются условию нормировки

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad |\alpha'|^2 + |\beta'|^2 = 1, \quad (4.18)$$

причем из общих соображений ясно, что $|\alpha|, |\alpha'| \ll 1$. Коэффициент α' оценивался в работе [28] для структуры с монослоем из метода функционала плотности: $|\alpha|^2 \approx 0.02$. Коэффициент $\alpha' \neq 0$ только в гетеробислоях.

Смешивание состояний, описываемое уравнениями (4.17), открывает возможность перехода между ними в электрическом дипольном приближении. Для демонстрации этого рассчитаем матричный элемент оператора импульса $\hat{\mathbf{p}}$ между соответствующими состояниями:

$$\begin{aligned} p_{\downarrow\uparrow} &= \langle \Gamma_4 | \mathbf{e}_- \cdot \hat{\mathbf{p}} | \Gamma_6 \rangle \\ &= -\alpha^* \beta' \langle \mathcal{Z} | p_x | \mathcal{X} \rangle - \alpha' \beta^* \left\langle \frac{\mathcal{X} + i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}} \left| p_x + ip_y \right| \frac{\mathcal{X}' - i\mathcal{Y}'}{\sqrt{2}} \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.19)$$

При этом мы учли лишь вклады, диагональные по спину. Видно, что в меру $\alpha, \alpha' \neq 0$ такие переходы возможны: матричный элемент $\mathcal{Z} | p_x | \mathcal{X} \rangle$ не равен нулю в силу отсутствия горизонтальной плоскости отражения в группе симметрии бислоя, а матричный элемент

$$\left\langle \frac{\mathcal{X} + i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}} \left| p_x + ip_y \right| \frac{\mathcal{X}' - i\mathcal{Y}'}{\sqrt{2}} \right\rangle \equiv \gamma_6$$

в обозначениях [16] обусловлен наличием оси вращения третьего порядка в группе симметрии монослоя. Поскольку $p_{\downarrow\uparrow} \neq 0$ не содержит напрямую релятивистской малости, можно ожидать, что именно электродипольные переходы будут доминировать. В частности, такие переходы могут отвечать за межподзонное поглощение излучения ТГц диапазона, недавно обнаруженное в экспериментах, выполненных группой проф. А. Черникова в Техническом университете Дрездена.

Для будущего сравнения с экспериментальными данными приведем расчет темпа перехода между спиновыми подзонами под действием циркулярно поляризованного излучения. Для этого воспользуемся золотым правилом Ферми и запишем

$$W_{\downarrow\uparrow} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eE_0}{m_0\omega} \right)^2 \sum_{\mathbf{k}} |p_{\downarrow\uparrow}|^2 \delta(\hbar\omega + E_{\mathbf{k}\uparrow} - E_{\mathbf{k}\downarrow}) f_{\mathbf{k}}, \quad (4.20)$$

где $E_{\mathbf{k}\uparrow/\downarrow}$ – дисперсия электрона в соответствующей спиновой подзоне, ω – частота падающего электромагнитного поля, E_0 – амплитуда электромагнитного поля в заданной циркулярной поляризации, $f_{\mathbf{k}}$ – функция распределения электронов в нижней спиновой подзоне. Заполнением верхней подзоны зоны проводимости мы пренебрегаем. Пренебрегая малой разностью эффективных масс подзон из формулы (4.20) получаем

$$W_{\downarrow\uparrow} = \frac{2\pi}{\hbar} N_e D |p_{\downarrow\uparrow}|^2 \left(\frac{eE_0}{m_0\omega} \right)^2 \theta(\hbar\omega - \Delta_{SO}^c), \quad (4.21)$$

где D – плотность состояний, Δ_{SO}^c – спин-орбитальное расщепление в зоне проводимости, $N_e = \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}$ – концентрация электронов в данной долине. Отметим, что спектр поглощения представляет собой “ступеньку”, причем поглощение начинается от энергии $\hbar\omega = \Delta_{SO}^c$.

4.4 Гамильтониан Рашбы в гетеробислоях

Наличие ненулевого матричного элемента импульса $p_{\downarrow\uparrow}$ между электронными блоховскими функциями спиновых подзон в K -точке зоны Бриллюэна приводит еще к одной важной особенности: возникновению линейных по волновому вектору спин-зависимых членов в эффективном гамильтониане электронов в гетеробислоях.

Построим соответствующий гамильтониан – аналог гамильтониана Рашбы – сочетая $k \cdot p$ -метод теории возмущений и метод инвариантов. Введем спиновые матрицы Паули

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z),$$

действующие в базисе спиновых состояний Γ_6, Γ_4 . В группе C_3 матрица σ_z оказывается инвариантом и входит в гамильтониан со множителем

$$\frac{\Delta_{SO}^c}{2}.$$

Этот вклад отвечает за спиновое расщепление подзон внутри данной долины. Отметим, что в долине K^- аналогичный вклад будет с противоположным знаком, что отражает симметрию системы к инверсии времени. Помимо этого, симметрия C_3 допускает линейные по \mathbf{k} члены вида $\alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)$. Коэффициент перед ними легко установить, вычислив оператор скорости электрона, пользуясь эффективным гамильтонианом и сопоставив этот ответ с расчетом в $k \cdot p$ -методе (4.19). Окончательно получаем, что

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{I} + \frac{\Delta_{SO}^c}{2} \sigma_z + \frac{\hbar p_{\downarrow\uparrow}}{m_0} (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \quad (4.22)$$

где m_0 – масса свободного электрона, а \hat{I} – единичная матрица 2×2 . Отметим, что симметрия системы допускает спин-зависимую поправку к эффективной массе электронов, которая может быть описана квадратичной по \mathbf{k} поправкой к Δ_{SO}^c .

Гамильтониан (4.22) является аналогом гамильтониана Рашбы для гетеробислоев дихалькогенидов переходных металлов.

Следует подчеркнуть, что расчет интенсивности межподзонных переходов с переворотом спина, представленный выражениями (4.20) и (4.21) можно выполнить, используя непосредственно гамильтониан (4.22), в котором следует выполнить замену $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - (e/\hbar c)\mathbf{A}$, где \mathbf{A} – векторный потенциал электромагнитного поля. Естественно, такой расчет приводит к тому же ответу, формула (4.21).

Глава 5

Заключение

В данной работе проведено теоретическое исследование межподзонных переходов с переворотом спина в гетеробислоях дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ). Основные результаты работы можно резюмировать следующим образом.

1. Для шести высокосимметричных укладок гетеробислоев ДПМ выполнен детальный анализ правил отбора для переходов между спиновыми подзонами зоны проводимости. Показано, что в отличие от монослоев, где такие переходы разрешены только в магнитодипольном приближении, в гетеробислоях они могут возбуждаться и электрическим полем электромагнитной волны. Это открывает возможность электрического дипольного спинового резонанса в таких системах.
2. Установлены поляризационные зависимости переходов для каждой из шести укладок. Определено, в каких циркулярных (σ^+ или σ^-) поляризациях возможны переходы между спиновыми подзонами. Это позволяет предсказать экспериментально наблюдаемые сигналы в зависимости от типа укладки.
3. Предложена модель, объясняющая возможность электрического дипольного спинового резонанса через смешивание состояний зоны проводимости с возбужденными зонами за счет спин-орбитального взаимодействия. Показано, что матричные эле-

менты таких переходов могут быть значительными, что делает их наблюдаемыми в эксперименте.

4. Построен аналог гамильтониана Рашбы для зоны проводимости в гетеробислоях дихалькогенидов переходных металлов.

Полученные результаты согласуются с недавними экспериментальными данными по межподзонному поглощению в терагерцовом диапазоне, что подтверждает актуальность и практическую значимость проведенного исследования. Таким образом, работа демонстрирует, что гетеробислои ДПМ представляют собой интересную платформу для изучения спиновых переходов, управляемых электрическим полем, что может найти применение в спинтронике и квантовых технологиях.

Литература

- [1] Diana Y. Qiu, Felipe H. da Jornada, and Steven G. Louie. Optical spectrum of MoS_2 : Many-body effects and diversity of exciton states. Phys. Rev. Lett., 111:216805, Nov 2013.
- [2] Hongliang Shi, Hui Pan, Yong-Wei Zhang, and Boris I. Yakobson. Quasiparticle band structures and optical properties of strained monolayer MoS_2 and WS_2 . Phys. Rev. B, 87:155304, Apr 2013.
- [3] Galan Moody, John Schaibley, and Xiaodong Xu. Exciton dynamics in monolayer transition metal dichalcogenides. J. Opt. Soc. Am. B, 33(7):C39–C49, Jul 2016.
- [4] Xiaodong Li, Jeffrey T. Mullen, Zhenghe Jin, Kostyantyn M. Borysenko, M. Buongiorno Nardelli, and Ki Wook Kim. Intrinsic electrical transport properties of monolayer silicene and MoS_2 from first principles. Phys. Rev. B, 87:115418, Mar 2013.
- [5] Agnieszka Kuc, Nourdine Zibouche, and Thomas Heine. Influence of quantum confinement on the electronic structure of the transition metal sulfide $TS(2)$. Physical Review B, 83:245213, 06 2011.
- [6] Qing Hua Wang, Kouros Kalantar-Zadeh, Andras Kis, Jonathan Coleman, and Michael Strano. Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides. Nature Nanotechnology, 7:699–712, 11 2012.
- [7] Thorsten Deilmann and Kristian Sommer Thygesen. Finite-

momentum exciton landscape in mono- and bilayer transition metal dichalcogenides. 2D Materials, 6(3):035003, apr 2019.

- [8] Gui-Bin Liu, Wen-Yu Shan, Yugui Yao, Wang Yao, and Di Xiao. Three-band tight-binding model for monolayers of group-VIB transition metal dichalcogenides. Physical Review B, 88, 05 2013.
- [9] Andor Kormányos, Guido Burkard, Martin Gmitra, Jaroslav Fabian, Viktor Zólyomi, Neil D Drummond, and Vladimir Fal'ko. k-p theory for two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors. 2D Materials, 2(2):022001, apr 2015.
- [10] G. Wang, C. Robert, M.M. Glazov, F. Cadiz, E. Courtade, T. Amand, D. Lagarde, T. Taniguchi, K. Watanabe, B. Urbaszek, and X. Marie. In-plane propagation of light in transition metal dichalcogenide monolayers: Optical selection rules. Physical Review Letters, 119(4), July 2017.
- [11] Gang Wang, Xavier Marie, I Gerber, Thierry Amand, D. Lagarde, Louis Bouet, M Vidal, A. Balocchi, and Bernhard Urbaszek. Giant enhancement of the optical second-harmonic emission of WSe_2 monolayers by laser excitation at exciton resonances. Physical Review Letters, 114:097403, 03 2015.
- [12] Э. И. Рашба, В. И. Шека. Симметрия энергетических зон в Кристаллах типа вюрцита. II Симметрия зон учетом спин-орбитального взаимодействия. ФТТ, 162, 1959.
- [13] Э. И. Рашба. Свойства полупроводников с петлей экстремумов. I. Циклотронный и комбинационный резонанс в магнитном поле, перпендикулярном плоскости петли. ФТТ, (2):1224, 1960.
- [14] E Rashba and A. Efros. Orbital mechanisms of electron-spin manipulation by an electric field. Physical Review Letters, 91:126405, 10 2003.

- [15] М. В. Дурнев, М. М. Глазов. Экситоны и трионы в двумерных полупроводниках на основе дихалькогенидов переходных металлов. Усп. физ. наук, 188(9):913–934, 2018.
- [16] M. M. Glazov, L. E. Golub, G. Wang, X. Marie, T. Amand, and B. Urbaszek. Intrinsic exciton-state mixing and nonlinear optical properties in transition metal dichalcogenide monolayers. Physical Review B, 95(3), January 2017.
- [17] K. Kośmider, J. W. González, and J. Fernández-Rossier. Large spin splitting in the conduction band of transition metal dichalcogenide monolayers. Physical Review B, 88(24), December 2013.
- [18] Ashwin Ramasubramaniam. Large excitonic effects in monolayers of molybdenum and tungsten dichalcogenides. Physical Review B, 86, 09 2012.
- [19] Andor Kormányos, Viktor Zólyomi, Neil Drummond, and Guido Burkard. Spin-orbit coupling, quantum dots, and qubits in monolayer transition metal dichalcogenides. Physical Review X, 4:011034, 03 2014.
- [20] G.F. Koster. Properties of the Thirty-two Point Groups. M.I.T. Press research monographs. Massachusetts Institute of Technology, 1963.
- [21] Yinghui Sun, Rongming Wang, and Kai Liu. Substrate induced changes in atomically thin 2-dimensional semiconductors: Fundamentals, engineering, and applications. Applied Physics Reviews, 4:011301, 03 2017.
- [22] Michael Förg, Leo Colombier, Robin Patel, Jessica Lindlau, A. Mohite, Hisato Yamaguchi, David Hunger, and Alexander Högele. Cavity-control of bright and dark interlayer excitons in van der Waals heterostructures. Nature Communications, 10, 08 2019.

- [23] Hongyi Yu, Xiaodong Cui, Xiaodong Xu, and Wang Yao. Valley excitons in two-dimensional semiconductors. National Science Review, 2(1):57–70, January 2015.
- [24] K. Kořmider and J. Fernandez-Rossier. Electronic properties of the MoS_2 - WS_2 heterojunction. Phys. Rev. B, 87:075451, Feb 2013.
- [25] Zhirui Gong, Gui-Bin Liu, Hongyi Yu, Di Xiao, Xiaodong Cui, Xiaodong Xu, and Wang Yao. Magnetoelectric effects and valley-controlled spin quantum gates in transition metal dichalcogenide bilayers. Nature Communications, 4:2053, 06 2013.
- [26] Fangqi Yu, Weihua Yang, Jun Kang, Rao Huang, Lei Li, and Yuhua Wen. Engineering the band structure of type-II $MoSe_2/WSe_2$ van der waals heterostructure by electric field and twist angle: a first principles perspective. Journal of Physics: Condensed Matter, 37, 12 2024.
- [27] Shen Zhao, Zhijie Li, Xin Huang, Anna Rupp, Jonas Goser, Ilia A. Vovk, Stanislav Yu. Kruchinin, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Ismail Bilgin, Anvar S. Baimuratov, and Alexander Hogele. Excitons in mesoscopically reconstructed moire heterostructures. Nature Nanotechnology, 18(6):572–579, March 2023.
- [28] D. Lagarde, Mikhail Glazov, Vishwas Jindal, Konstantinos Mourzidis, Iann Gerber, A. Balocchi, Laurent Lombez, P. Renucci, Takashi Taniguchi, K. Watanabe, C. Robert, and Xavier Marie. Efficient electron spin relaxation by chiral phonons in WSe_2 monolayers. Phys. Rev. B, 07 2024.
- [29] Andor Kormanyos, Viktor Zolyomi, Neil Drummond, Peter Rakyta, Guido Burkard, and Vladimir Falko. Monolayer MoS_2 : Trigonal warping, the Γ valley, and spin-orbit coupling effects. Physical Review B, 88, 04 2013.
- [30] Gui-Bin Liu, Di Xiao, Yugui Yao, Xiaodong Xu, and Wang Yao. Cheminform abstract: Electronic structures and theoretical

modelling of two-dimensional group-VIB transition metal dichalcogenides. Chemical Society reviews, 44, 12 2014.

- [31] C. Robert, Bo Han, Piotr Kapuściński, A. Delhomme, Clément Faugeras, Thierry Amand, Maciej Molas, M. Bartos, K. Watanabe, Takashi Taniguchi, Bernhard Urbaszek, M. Potemski, and Xavier Marie. Measurement of the spin-forbidden dark excitons in MoS_2 and $MoSe_2$ monolayers. Nature Communications, 11, 08 2020.