ГАЛЬВАНОМЕХАНИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ ДИРАКОВСКИХ 2D МОНОСЛОЙНЫХ МАТЕРИАЛАХ

Снегирев А.В. Ковалев В.М. Энтин М.В.

Институт физики полупроводников СО РАН

Новосибирский государственный университет

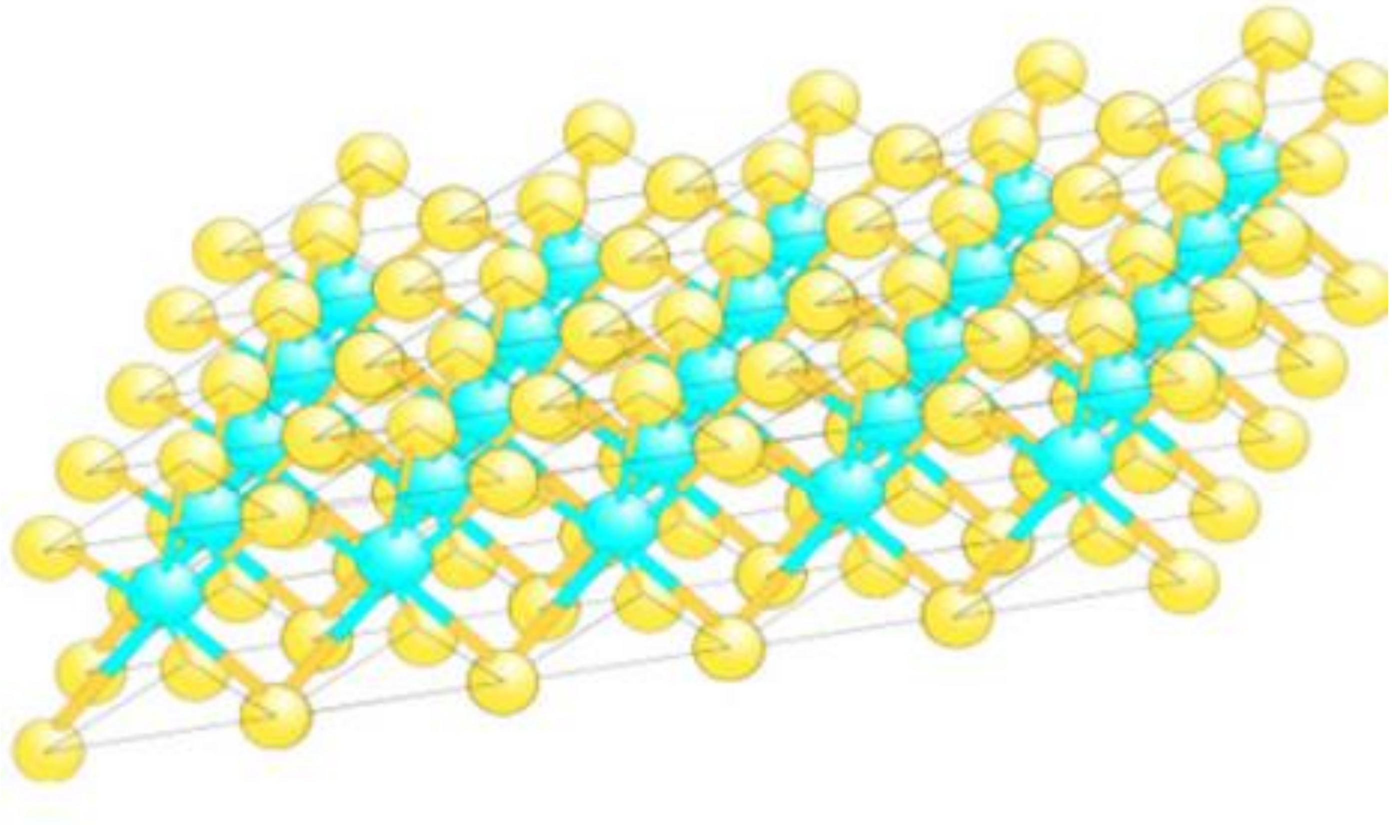
INSTITUTE OF SEMICONDUCTOR PHYSICS, SIBERIAN BRANCH OF THE RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCE

Novosibirsk State University

Содержание

- Монослои MX_2
- Ток, вызванный обобщенными силами
- Гамильтониан с учётом деформации
- Междолинное рассеяние в легированном и чистом образцах
- Заключение

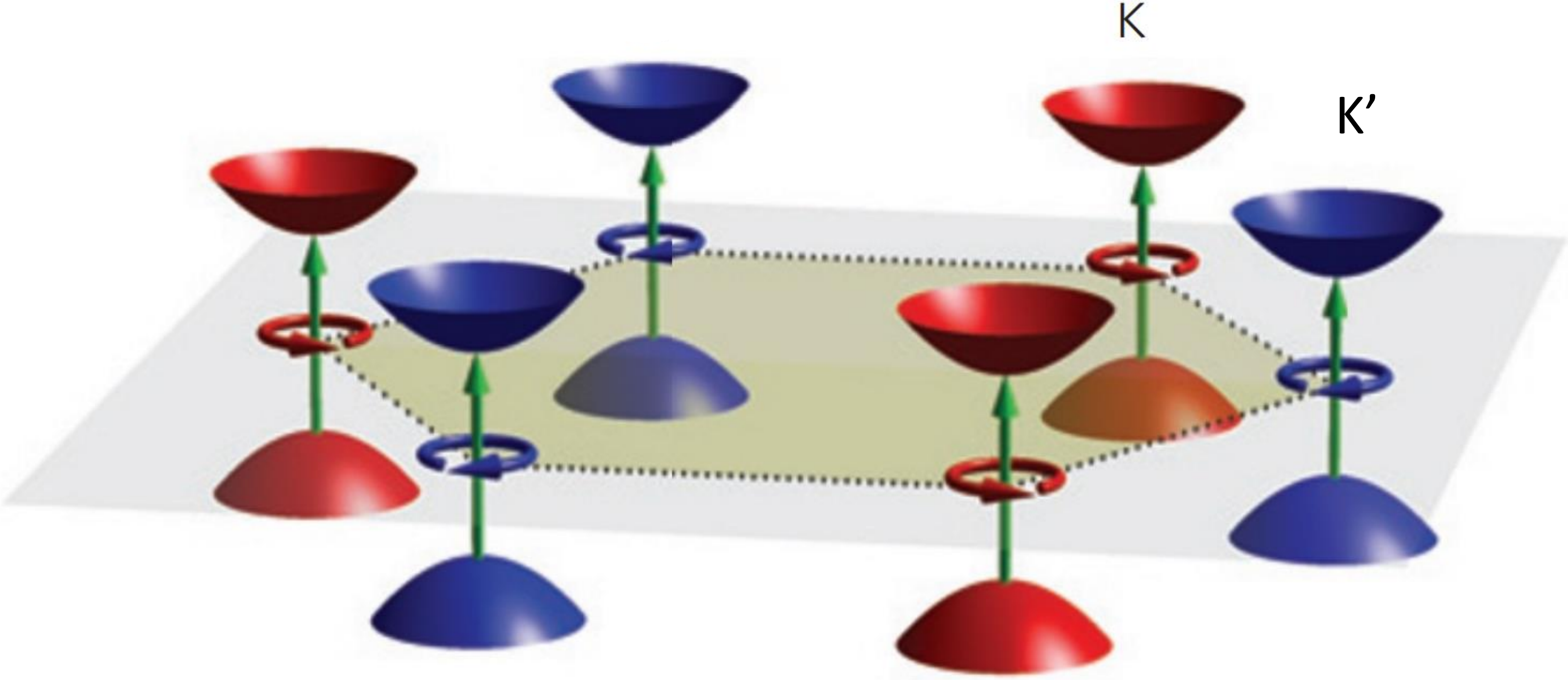
Дихалькогениды переходных металлов



 -Mo,W

 - S, Se, Te

Спектр вблизи К-точек



Ток, вызванный обобщенными силами

$$j_i = \gamma_i^{(0)} F + \gamma_{ij}^{(1)} F_j + \gamma_{ijk}^{(2)} F_j F_k + \ldots$$

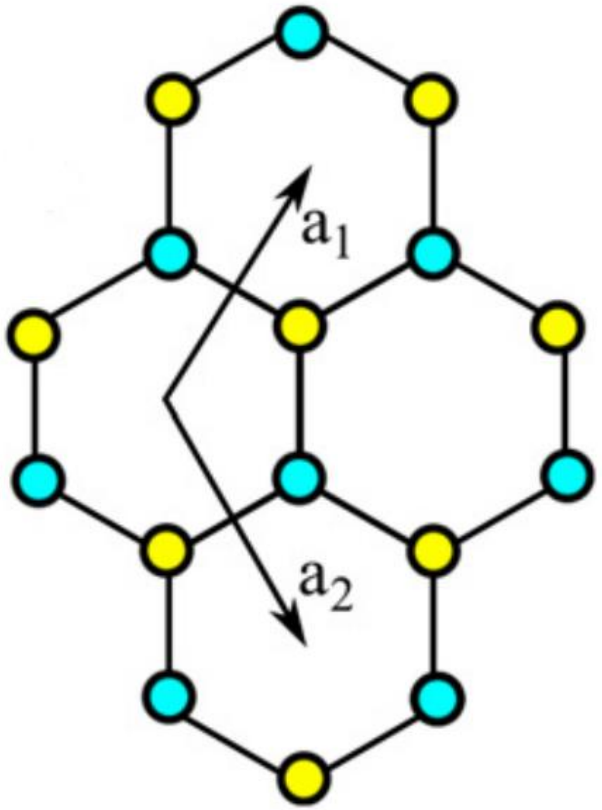
$$u_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \Rightarrow j_\alpha = \lambda_{\alpha\beta\gamma} u_{\beta\gamma} \Delta N$$

Соображения симметрии

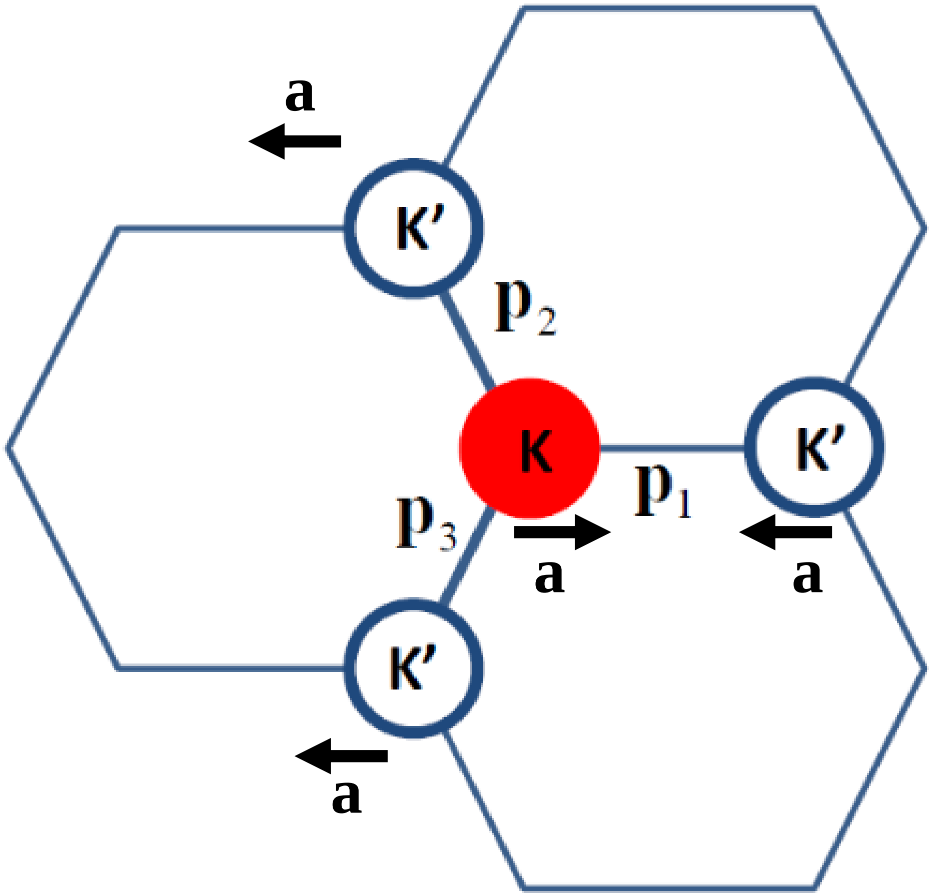
Группа симметрии кристалла – D_{3h}

Соотношения между компонентами тензоров 3-го ранга

$$\lambda_{xxx} = -\lambda_{xyy} = -\lambda_{yxy} = -\lambda_{yyx} = \lambda$$



Гамильтониан с учётом деформации

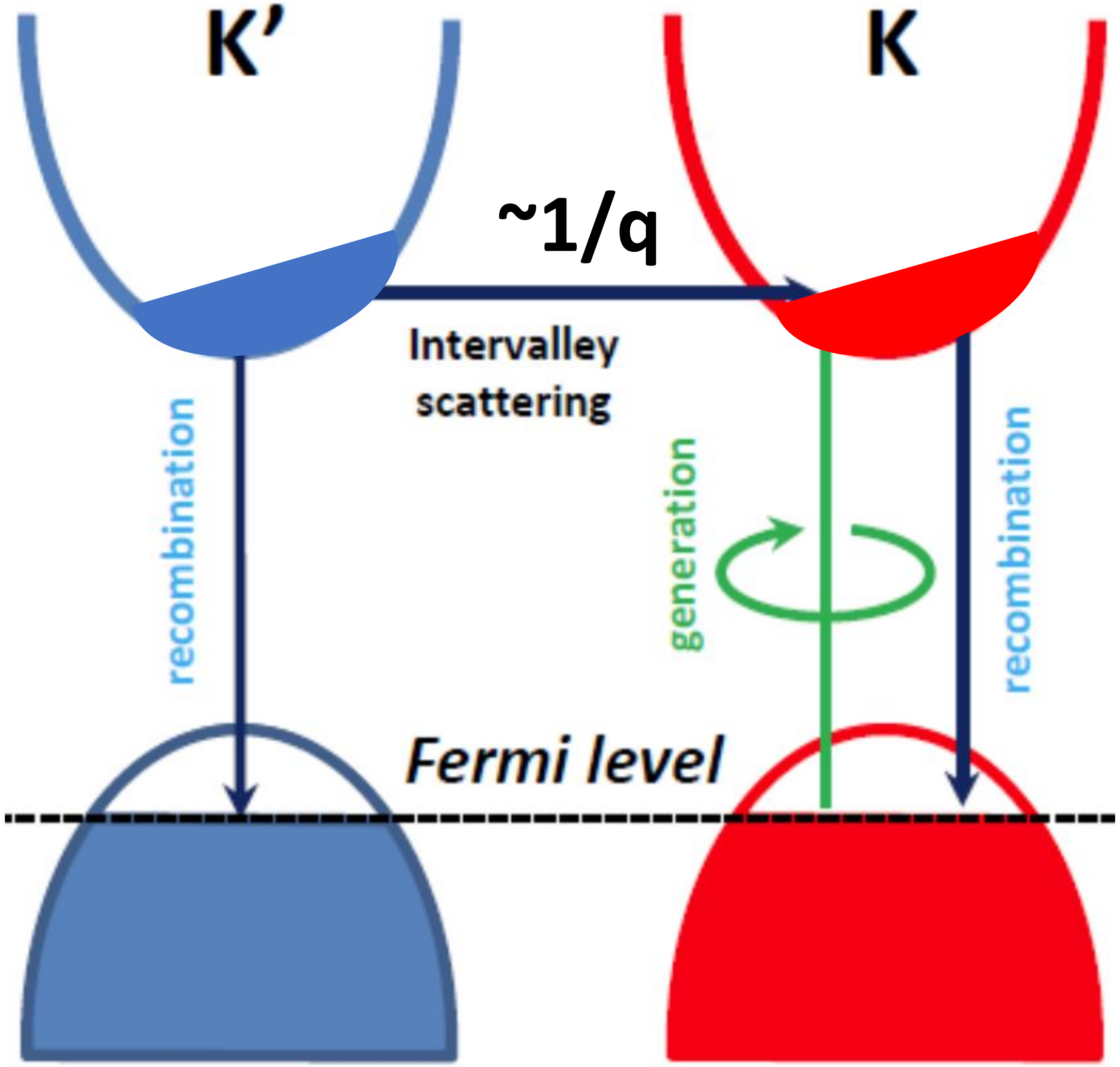


$$H = \begin{pmatrix} \Delta/2 & v(\mathbf{k}-\mathbf{a})_- \\ v(\mathbf{k}-\mathbf{a})_+ & -\Delta/2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a} = \eta\Xi(u_{yy} - u_{xx}; 2u_{xy})$$

$$(\mathbf{k}-\mathbf{a})_\pm = \eta(k_x - a_x) \pm i(k_y - a_y)$$

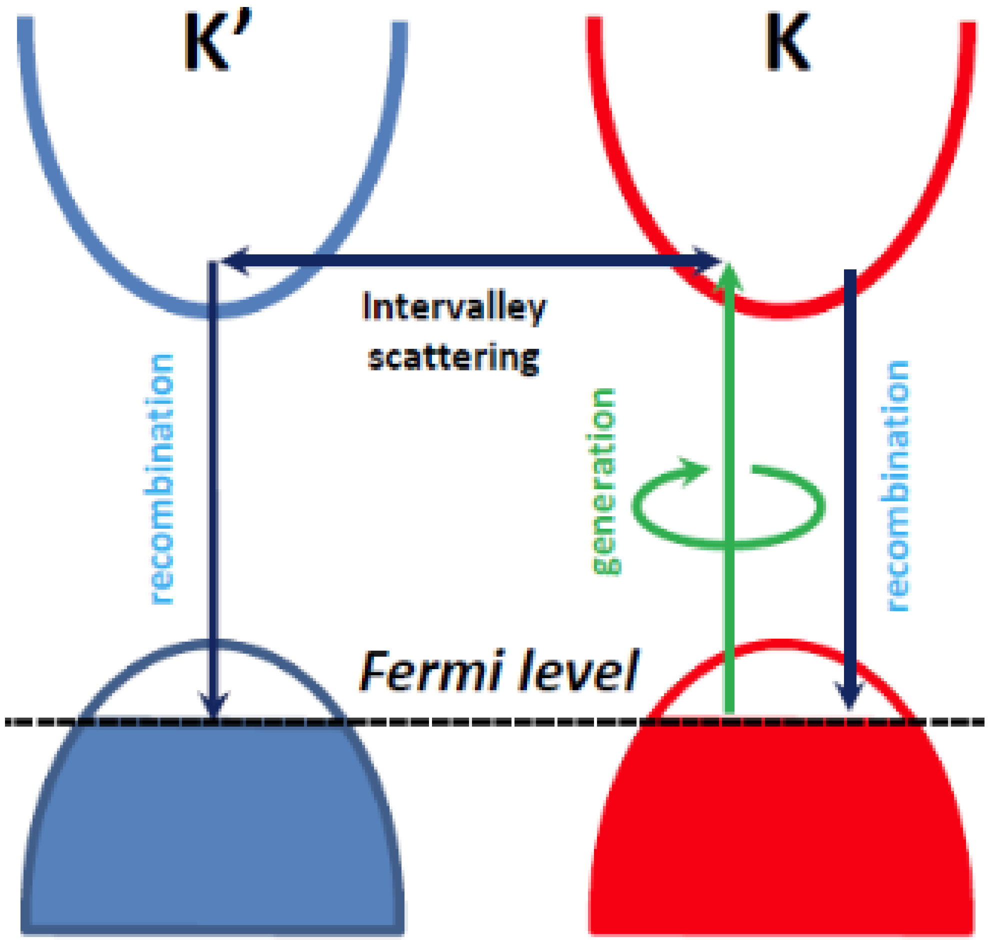
Междолинное рассеяние



n-(p-) легированный образец

$$\frac{f_{\mathbf{k}}^{+}}{\tau_R} = g_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{K}} \left(W_{\mathbf{kK}}^{+-} f_{\mathbf{K}}^{-} - W_{\mathbf{Kk}}^{-+} f_{\mathbf{k}}^{+} \right)$$

$$\frac{f_{\mathbf{K}}^{-}}{\tau_R} = \sum_{\mathbf{k}} \left(W_{\mathbf{Kk}}^{-+} f_{\mathbf{k}}^{+} - W_{\mathbf{kK}}^{+-} f_{\mathbf{K}}^{-} \right)$$



$$f_{\mathbf{k}}^{+} = f_{\mathbf{k}}^{0} + \delta f_{\mathbf{k}}^{+}$$

$$f_{\mathbf{K}}^{-} = 0 + \delta f_{\mathbf{K}}^{-}$$

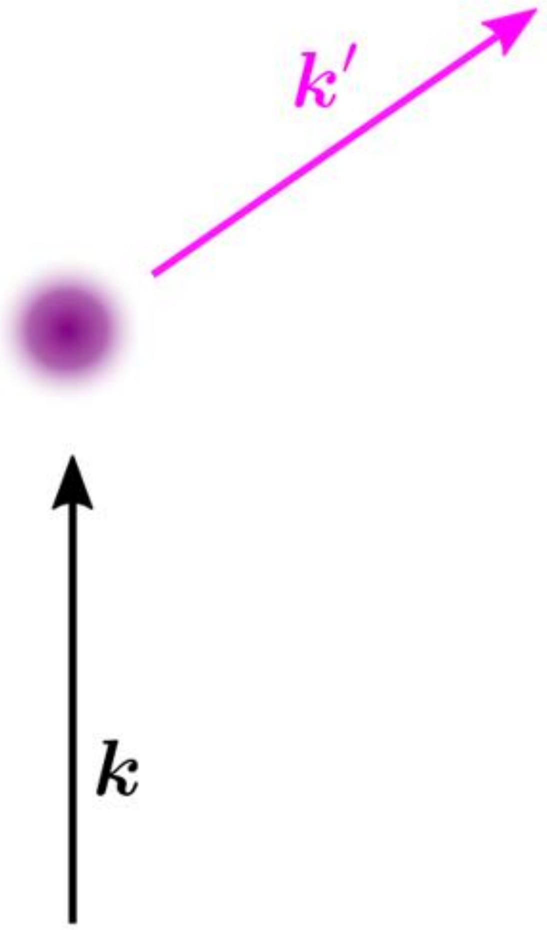
$$\delta f_{\mathbf{k}}^{+} = -\tau_R^2 g_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{K}} W_{\mathbf{Kk}}^{-+}$$

$$\delta f_{\mathbf{K}}^{-} = \tau_R^2 \sum_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{Kk}}^{-+} g_{\mathbf{k}}$$

$$\mathbf{j}^{\pm} = e \textstyle\sum_{\mathbf{K}} \mathbf{v}_{\mathbf{K}}^{\pm} \delta f_{\mathbf{K}}^{\pm}$$

$$\mathbf{j} = -\frac{e\tau_R^2}{3} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{K}} \left(\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^{+} - \mathbf{v}_{\mathbf{K}}^{-}\right) g_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{Kk}}^{-+}$$

Рассеяние на примесях



$$V(\mathbf{k}' + \mathbf{p}_i - \mathbf{k}) \to V(\mathbf{k}' + \mathbf{p}_i - \mathbf{k} + 2\mathbf{a})$$

$$|M_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{-+}|^2 \approx |M(\mathbf{p}_i)|^2 + \frac{\partial |M(\mathbf{p}_i)|^2}{\partial (p_i)_\alpha}(2a_\alpha + \Delta k_\alpha)$$

$$+ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 |M(\mathbf{p}_i)|^2}{\partial (p_i)_\alpha \partial (p_i)_\beta}(2a_\alpha + \Delta k_\alpha)(2a_\beta + \Delta k_\beta)$$

$$|M(\mathbf{p}_i)|^2 = n_i V_p^2 \quad \Bigg| \quad V_q = 2\pi e^2/\varepsilon|\mathbf{q}|$$

Матричные элементы

$$\delta W^{-+}_{\mathbf{Kk}} = 2\pi \langle \delta |M^{-+}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 \rangle \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}})$$

$$\delta |M^{-+}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 = \frac{\partial^2 |M(\mathbf{p}_i)|^2}{\partial(p_i)_\alpha \partial(p_i)_\beta} (a_\alpha \Delta k_\beta + a_\beta \Delta k_\alpha)$$

$$\langle \delta |M^{-+}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 \rangle = \sum_{\mathbf{p}_i} \delta |M^{-+}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 = 6 n_{imp} V_p^2 \frac{a_x (k'_x - k_x)}{p^2}$$

Результат

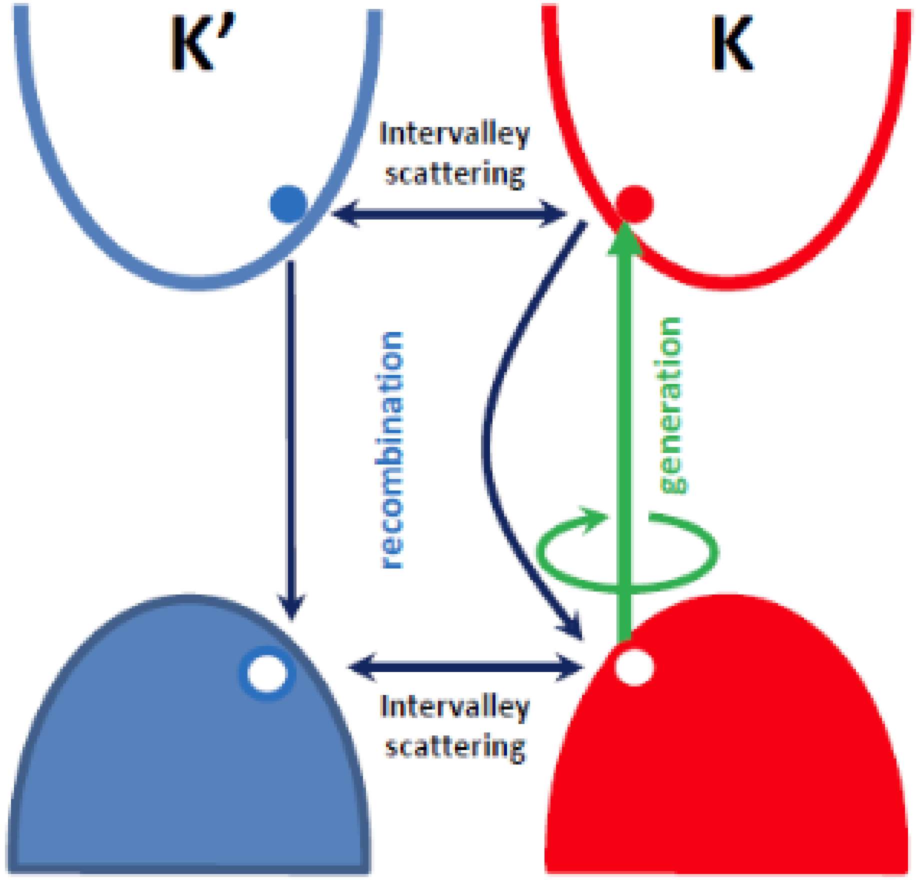
$$j_x = 2e\frac{\tau_R}{\tau_i}\frac{a_x}{\hbar p^2}(\hbar\omega - \Delta)N_e$$

$$\lambda = 2e\frac{\Xi}{\hbar p^2}\frac{\tau_R}{\tau_i}(\hbar\omega - \Delta)$$

$$\tau_i^{-1} = \frac{m n_i V_p^2}{\hbar^3}$$

$$N_e = \frac{1}{2}|M_0|^2 m\tau_R\theta[\omega - 2|\mu|]$$

Чистый образец



$$\sum_{\mathbf{k}_1} W^R_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} f^+_{\mathbf{k}} \phi^+_{\mathbf{k}_1} = g_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{K}'} \left(W^{+-}_{\mathbf{k}\mathbf{K}'} f^-_{\mathbf{K}'} - W^{-+}_{\mathbf{K}'\mathbf{k}} f^+_{\mathbf{k}} \right)$$

$$\sum_{\mathbf{K}_1} W^R_{\mathbf{K}\mathbf{K}_1} f^-_{\mathbf{K}} \phi^-_{\mathbf{K}_1} = \sum_{\mathbf{k}'} \left(W^{-+}_{\mathbf{K}\mathbf{k}'} f^+_{\mathbf{k}'} - W^{+-}_{\mathbf{k}'\mathbf{K}} f^-_{\mathbf{K}} \right)$$

$$f_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{2\pi\hbar}{m_c T} N^{\pm} e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}^{e}/T} \qquad \phi_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{2\pi\hbar}{m_v T} P^{\pm} e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}^{h}/T}$$

$$\Downarrow$$

$$\alpha N^{+} P^{+} = G - \frac{N^{+} - N^{-}}{\tau_v}$$

$$\alpha N^{-} P^{-} = -\frac{N^{-} - N^{+}}{\tau_v}$$

$$\alpha = \frac{(2\pi\hbar)^2}{m_c m_v T^2} W^R \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}^{e}/T} e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}_1}^{h}/T} \quad \Bigg| \quad \frac{1}{\tau_v} = \frac{2\pi\hbar}{m_c T} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{K}} W_{\mathbf{k}\mathbf{K}}^{0} e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}^{e}/T}$$

Результат

$$\mathbf{j} = -\frac{e}{3}\frac{2\pi\hbar\Delta N}{m_c T}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{K}}\left(\tau_R^+\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^+ - \tau_R^-\mathbf{v}_{\mathbf{K}}^-\right)\delta W_{\mathbf{Kk}}^{-+} e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}/T}$$

$$\lambda = 2e\frac{\Xi}{\hbar p^2}\left(\frac{\tau_R^+ + \tau_R^-}{2\tau_i}\right)(2T)$$

$$\Delta N = N^+ - N^-$$

$$(\tau_R^\pm)^{-1} = W^R \textstyle\sum_{\mathbf{k_1}} \phi_{\mathbf{k_1}}^\pm$$

Заключение

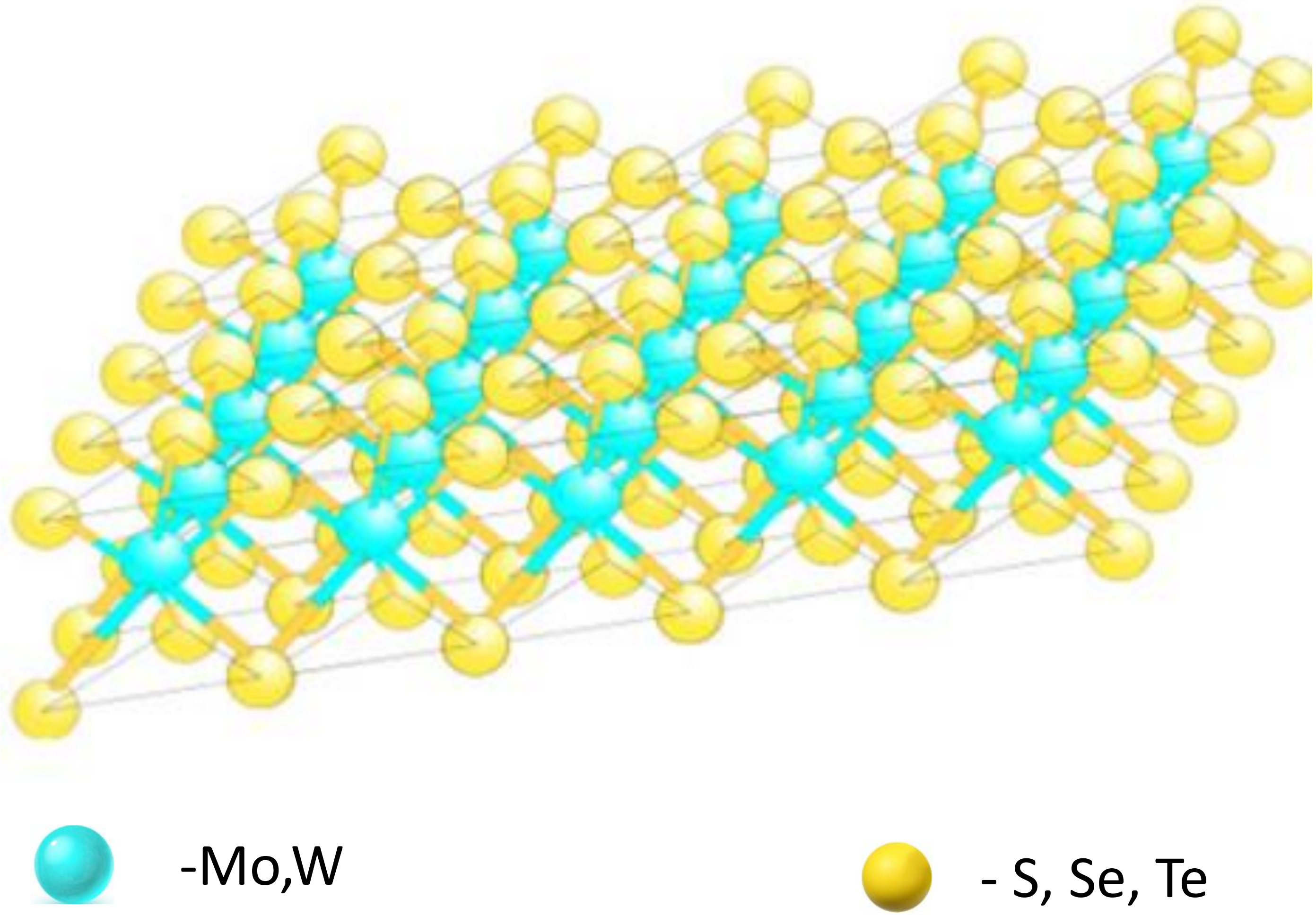
- Разработана теория фотогальванического эффекта, индуцированного облучением и одноосной деформацией
- Были рассмотрены случаи легированных и чистых образцов
- Полученные эффекты имеют долинный характер

Авторы благодарны С.А.Тарасенко за полезные обсуждения

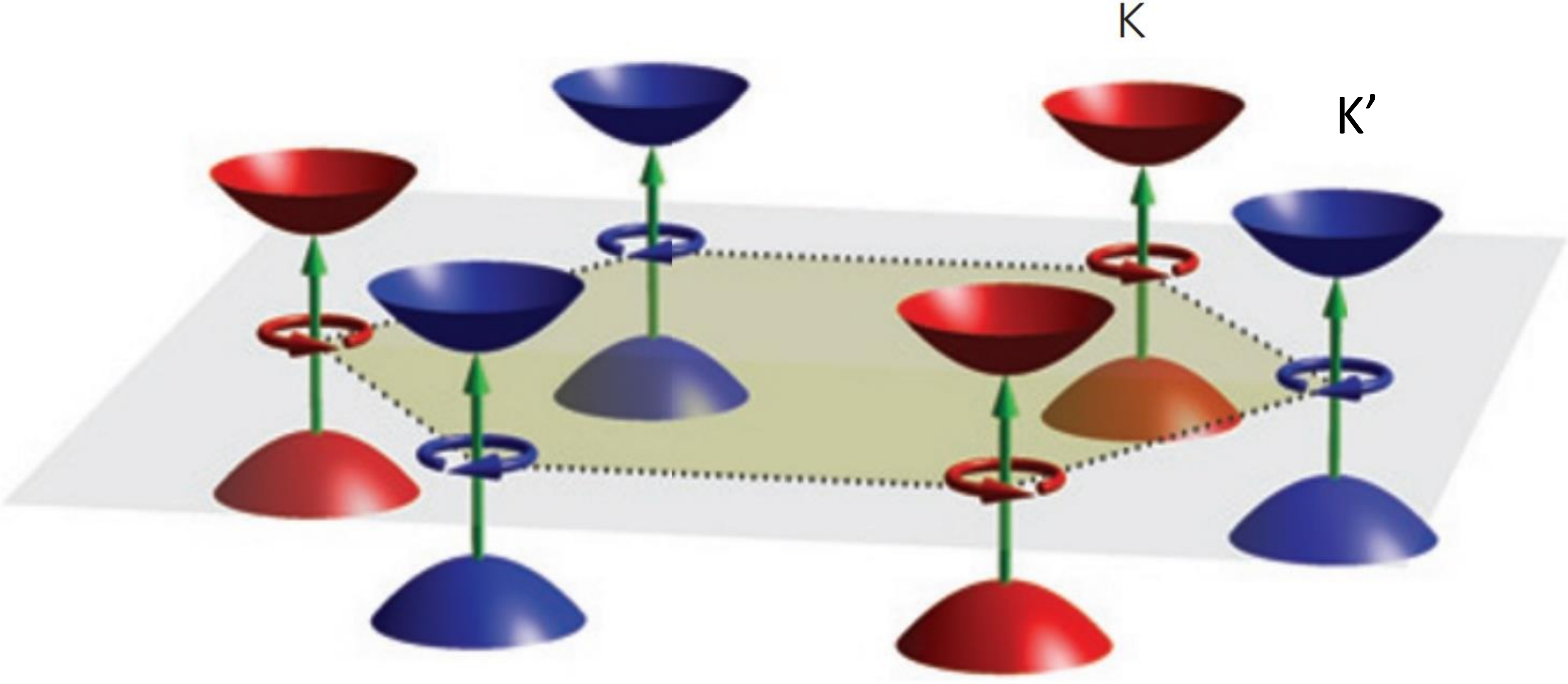
Содержание

- Монослои MX_2
- Ток, вызванный обобщенными силами
- Гамильтониан с учётом деформации
- Междолинное рассеяние в легированном и чистом образцах
- Заключение

Дихалькогениды переходных металлов



Спектр вблизи K-точек



Ток, вызванный обобщенными силами

$$j_i = \gamma_i^{(0)} F + \gamma_{ij}^{(1)} F_j + \gamma_{ijk}^{(2)} F_j F_k + \ldots$$

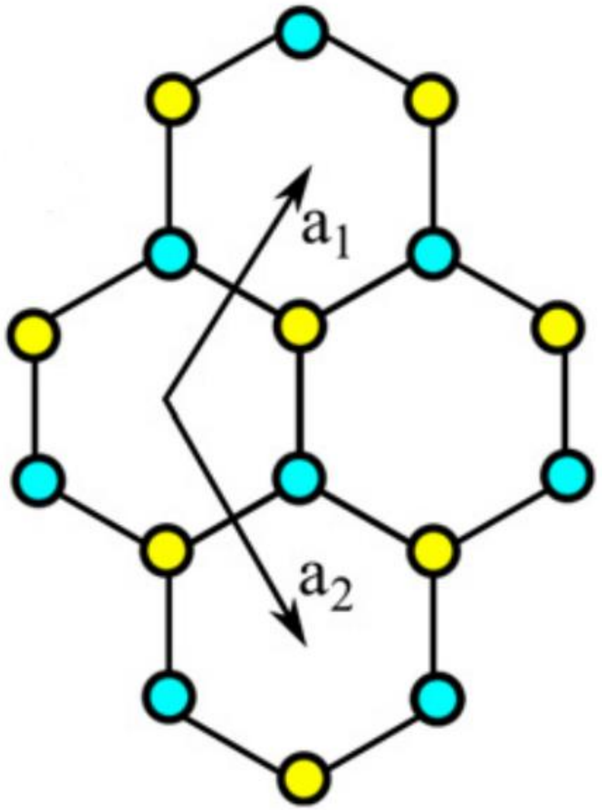
$$u_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \quad \Longrightarrow \quad j_\alpha = \lambda_{\alpha\beta\gamma} u_{\beta\gamma} \Delta N$$

Соображения симметрии

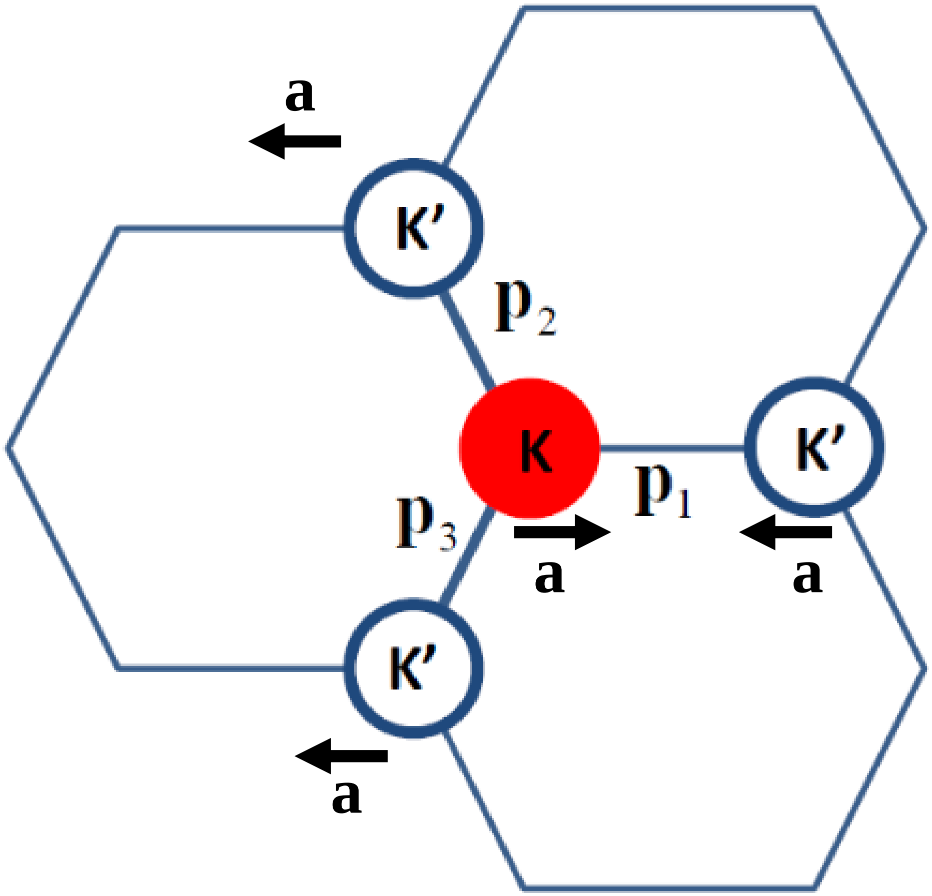
Группа симметрии кристалла – D_{3h}

Соотношения между компонентами тензоров 3-го ранга

$$\lambda_{xxx} = -\lambda_{xyy} = -\lambda_{yxy} = -\lambda_{yyx} = \lambda$$



Гамильтониан с учётом деформации

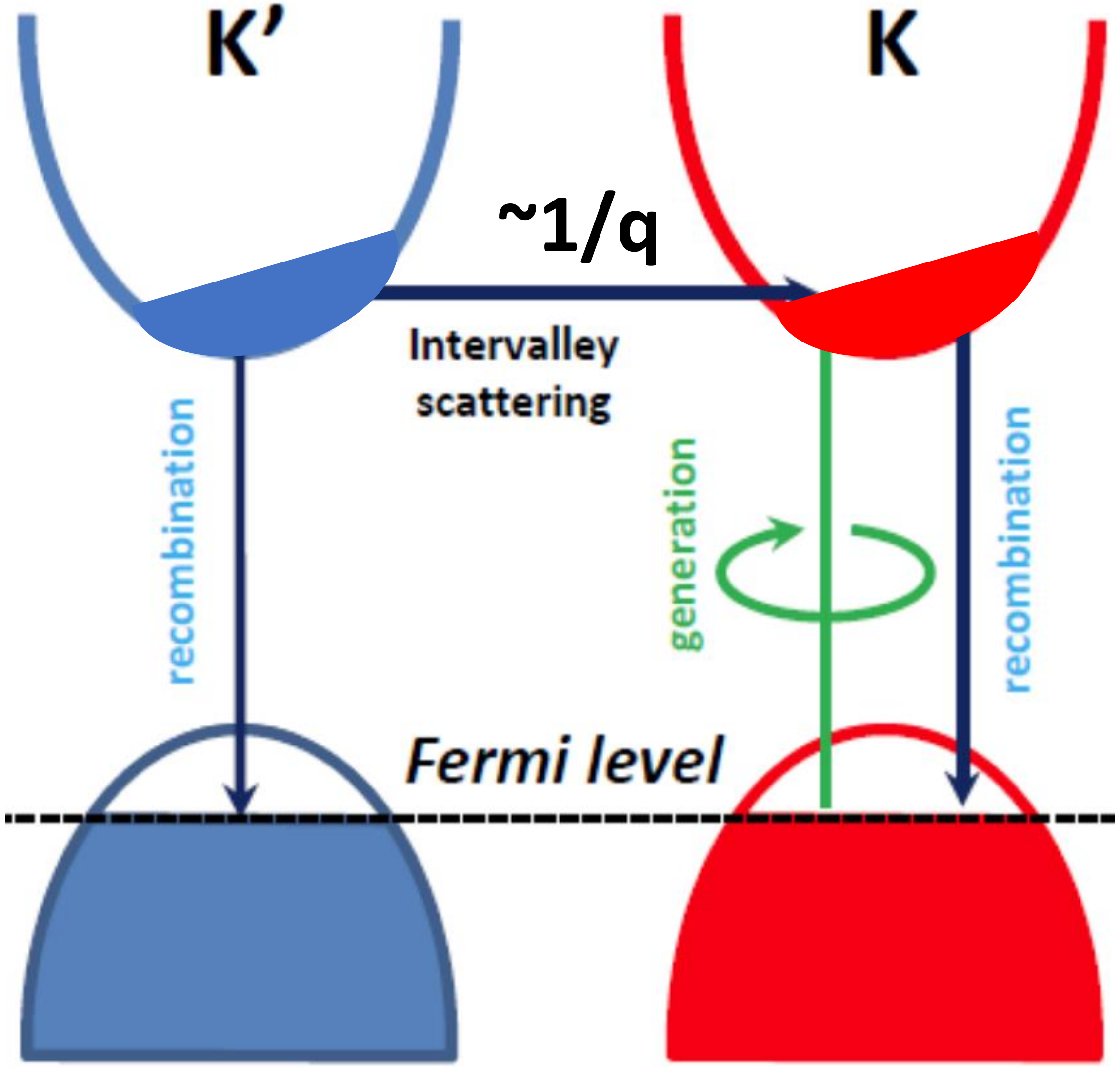


$$H = \begin{pmatrix} \Delta/2 & v(\mathbf{k}-\mathbf{a})_- \\ v(\mathbf{k}-\mathbf{a})_+ & -\Delta/2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a} = \eta\Xi(u_{yy} - u_{xx}; 2u_{xy})$$

$$(\mathbf{k}-\mathbf{a})_\pm = \eta(k_x - a_x) \pm i(k_y - a_y)$$

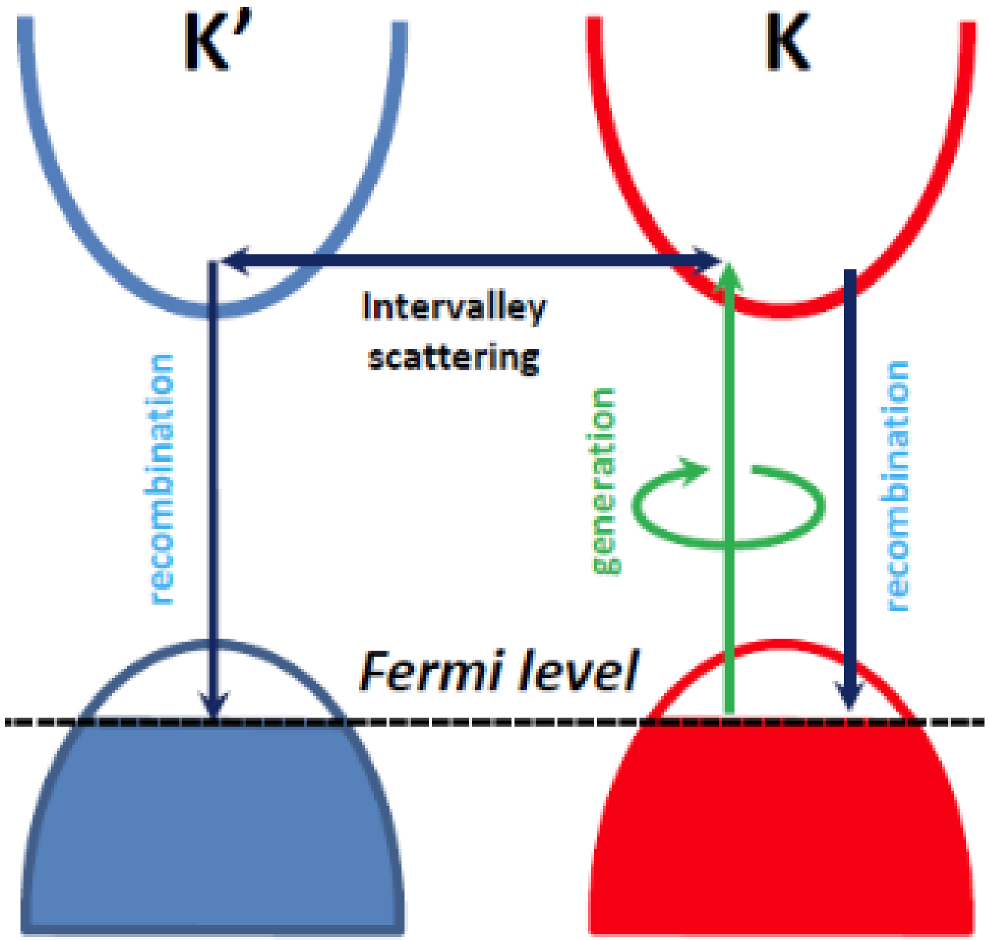
Междолинное рассеяние



n-(p-) легированный образец

$$\frac{f^{+}_{\mathbf{k}}}{\tau_R} = g_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{K}} \left(W^{+-}_{\mathbf{kK}} f^{-}_{\mathbf{K}} - W^{-+}_{\mathbf{Kk}} f^{+}_{\mathbf{k}} \right)$$

$$\frac{f^{-}_{\mathbf{K}}}{\tau_R} = \sum_{\mathbf{k}} \left(W^{-+}_{\mathbf{Kk}} f^{+}_{\mathbf{k}} - W^{+-}_{\mathbf{kK}} f^{-}_{\mathbf{K}} \right)$$



$$f_{\mathbf{k}}^{+} = f_{\mathbf{k}}^{0} + \delta f_{\mathbf{k}}^{+}$$

$$f_{\mathbf{K}}^{-} = 0 + \delta f_{\mathbf{K}}^{-}$$

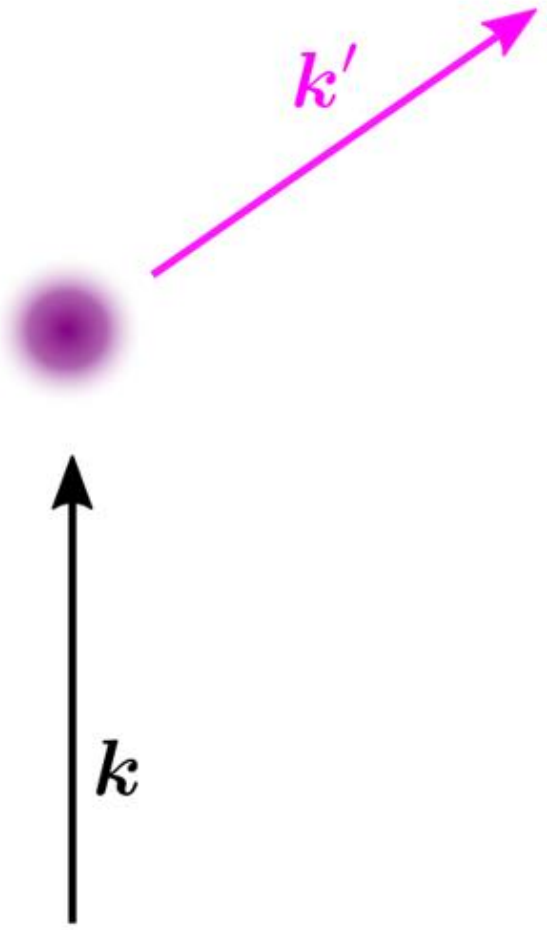
$$\delta f_{\mathbf{k}}^{+} = -\tau_R^2 g_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{K}} W_{\mathbf{Kk}}^{-+}$$

$$\delta f_{\mathbf{K}}^{-} = \tau_R^2 \sum_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{Kk}}^{-+} g_{\mathbf{k}}$$

$$\mathbf{j}^{\pm} = e \textstyle\sum_{\mathbf{K}} \mathbf{v}_{\mathbf{K}}^{\pm} \delta f_{\mathbf{K}}^{\pm}$$

$$\mathbf{j} = -\frac{e\tau_R^2}{3} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{K}} \left(\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^{+} - \mathbf{v}_{\mathbf{K}}^{-}\right) g_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{Kk}}^{-+}$$

Рассеяние на примесях



$$V(\mathbf{k}' + \mathbf{p}_i - \mathbf{k}) \to V(\mathbf{k}' + \mathbf{p}_i - \mathbf{k} + 2\mathbf{a})$$

$$|M_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{-+}|^2 \approx |M(\mathbf{p}_i)|^2 + \frac{\partial |M(\mathbf{p}_i)|^2}{\partial (p_i)_\alpha}(2a_\alpha + \Delta k_\alpha)$$
$$+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 |M(\mathbf{p}_i)|^2}{\partial (p_i)_\alpha \partial (p_i)_\beta}(2a_\alpha + \Delta k_\alpha)(2a_\beta + \Delta k_\beta)$$

$$|M(\mathbf{p}_i)|^2 = n_i V_p^2 \qquad V_q = 2\pi e^2/\varepsilon|\mathbf{q}|$$

Матричные элементы

$$\delta W^{-+}_{\mathbf{Kk}} = 2\pi \langle \delta | M^{-+}_{\mathbf{k'k}} |^2 \rangle \delta(\varepsilon_{\mathbf{k'}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})$$

$$\delta | M^{-+}_{\mathbf{k'k}} |^2 = \frac{\partial^2 | M(\mathbf{p}_i) |^2}{\partial(p_i)_\alpha \partial(p_i)_\beta} (a_\alpha \Delta k_\beta + a_\beta \Delta k_\alpha)$$

$$\langle \delta | M^{-+}_{\mathbf{k'k}} |^2 \rangle = \sum_{\mathbf{p}_i} \delta | M^{-+}_{\mathbf{k'k}} |^2 = 6 n_{imp} V_p^2 \frac{a_x (k'_x - k_x)}{p^2}$$

Результат

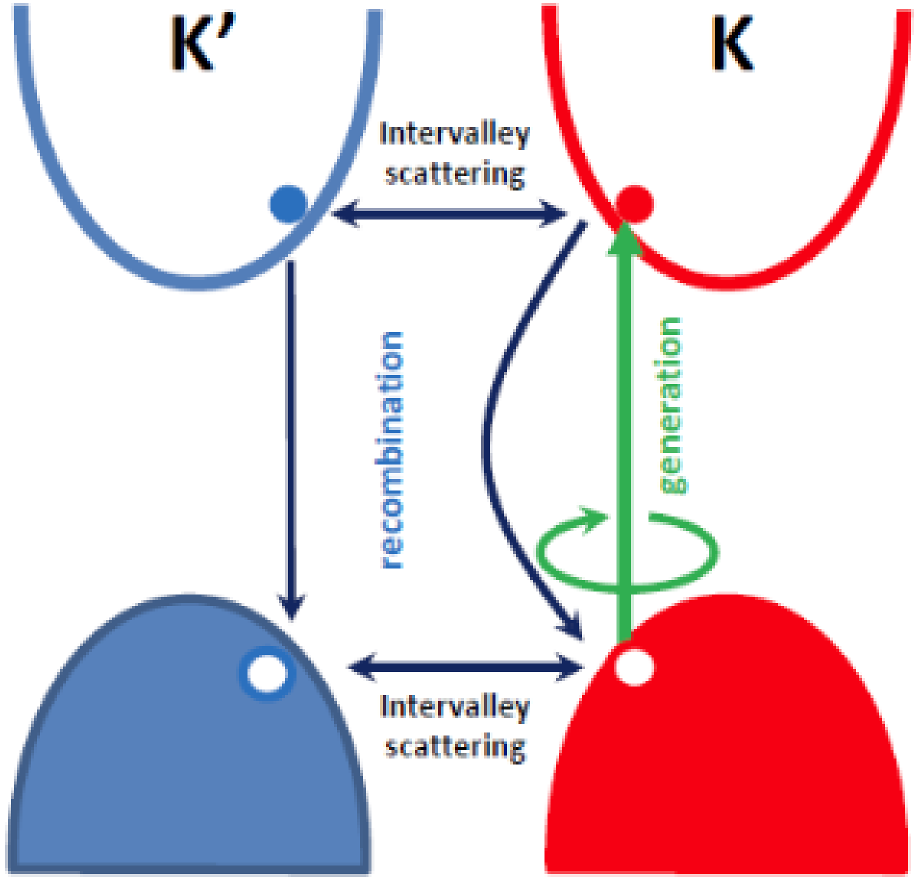
$$j_x = 2e\frac{\tau_R}{\tau_i}\frac{a_x}{\hbar p^2}(\hbar\omega - \Delta)N_e$$

$$\lambda = 2e\frac{\Xi}{\hbar p^2}\frac{\tau_R}{\tau_i}(\hbar\omega - \Delta)$$

$$\tau_i^{-1} = \frac{m n_i V_p^2}{\hbar^3}$$

$$N_e = \frac{1}{2}|M_0|^2 m\tau_R\theta[\omega - 2|\mu|]$$

Чистый образец



$$\sum_{\mathbf{k}_1} W^R_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} f^+_{\mathbf{k}} \phi^+_{\mathbf{k}_1} = g_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{K}'} \left(W^{+-}_{\mathbf{k}\mathbf{K}'} f^-_{\mathbf{K}'} - W^{-+}_{\mathbf{K}'\mathbf{k}} f^+_{\mathbf{k}} \right)$$

$$\sum_{\mathbf{K}_1} W^R_{\mathbf{K}\mathbf{K}_1} f^-_{\mathbf{K}} \phi^-_{\mathbf{K}_1} = \sum_{\mathbf{k}'} \left(W^{-+}_{\mathbf{K}\mathbf{k}'} f^+_{\mathbf{k}'} - W^{+-}_{\mathbf{k}'\mathbf{K}} f^-_{\mathbf{K}} \right)$$

$$f^{\pm}_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi\hbar}{m_c T} N^{\pm} e^{-\varepsilon^e_{\mathbf{k}}/T} \qquad \phi^{\pm}_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi\hbar}{m_v T} P^{\pm} e^{-\varepsilon^h_{\mathbf{k}}/T}$$

$$\Downarrow$$

$$\alpha N^+ P^+ = G - \frac{N^+ - N^-}{\tau_v}$$

$$\alpha N^- P^- = -\frac{N^- - N^+}{\tau_v}$$

$$\alpha = \frac{(2\pi\hbar)^2}{m_c m_v T^2} W^R \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} e^{-\varepsilon^e_{\mathbf{k}}/T} e^{-\varepsilon^h_{\mathbf{k}_1}/T} \qquad \frac{1}{\tau_v} = \frac{2\pi\hbar}{m_c T} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{K}} W^0_{\mathbf{k}\mathbf{K}} e^{-\varepsilon^e_{\mathbf{k}}/T}$$

Результат

$$\mathbf{j} = -\frac{e}{3}\frac{2\pi\hbar\Delta N}{m_c T}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{K}}\left(\tau_R^{+}\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^{+} - \tau_R^{-}\mathbf{v}_{\mathbf{K}}^{-}\right)\delta W_{\mathbf{Kk}}^{-+} e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}/T}$$

$$\lambda = 2e\frac{\Xi}{\hbar p^2}\left(\frac{\tau_R^{+} + \tau_R^{-}}{2\tau_i}\right)(2T)$$

$$\Delta N = N^{+} - N^{-}$$

$$(\tau_R^{\pm})^{-1} = W^R \textstyle\sum_{\mathbf{k_1}} \phi_{\mathbf{k_1}}^{\pm}$$

Заключение

- Разработана теория фотогальванического эффекта, индуцированного облучением и одноосной деформацией
- Были рассмотрены случаи легированных и чистых образцов
- Полученные эффекты имеют долинный характер