Письма в ЖЭТФ, том 121, вып. 5, с. 381 – 385

Длинноволновые междолинные плазмоны в монослое дихалькогенидов переходных металлов

Р. З. Витлина[1)], *Л. И. Магарилл*[1)], *А. В. Чаплик*[1)]

Институт физики полупроводников Сибирского отделения РАН им. А. В. Ржанова, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 28 декабря 2024 г.
После переработки 10 января 2025 г.
Принята к публикации 14 января 2025 г.

Найден спектр плазменных колебаний в полосе (плоской квантовой проволоке) монослоя дихалькогенидов переходных металлов. В длинноволновом пределе, помимо обычной ветви одномерных плазмонов, существует вторая ветвь с линейным законом дисперсии, обусловленная связью долин благодаря электрическому полю волны, а не виртуальным переходам электронов между долинами. В безграничной плоскости такая ветвь отсутствует.

DOI: 10.31857/S0370274X25030087, EDN: FASOMQ

1. Введение. Специфика электронной зонной структуры монослоев дихалькогенидов переходных металлов (ДХМП) приводит к качественным особенностям спектра плазменных колебаний в этих системах. Существование двух долин в электронном спектре и, следовательно, двух групп электронов делает плазму формально двухкомпонентной, и возникает вопрос о дополнительных ветвях плазмонного спектра, как это обычно бывает в многокомпонентных плазменных системах. Однако в данном случае электроны обеих групп движутся в одной и той же области пространства, следовательно, электрическое поле, действующее на них, одинаково. Одинаковы также их законы дисперсии $E(\mathbf{p})$, если импульсы $\mathbf{p}$ в каждой группе отсчитываются от центра "своей" долины (строго говоря, совпадение функций $E(\mathbf{p})$ в разных долинах имеет место для противоположных значений проекции спина электрона, но в зоне проводимости монослоев ДХМП спиновое расщепление существенно меньше запрещенной зоны, и мы не будем учитывать его в рассматриваемой задаче). Совпадение электронных спектров ведет к совпадению поляризационных операторов, которые входят в уравнения самосогласованного поля, определяющие спектр плазменных волн. Кроме них в уравнения самосогласованного поля входят форм-факторы – матричные элементы функции Грина уравнения Пуассона в задаче, соответствующей размерности по волновым функциям образца заданной геометрической формы. Для определения этих функций мы используем известную и широко применяемую в теории монослоев ДХМП минимальную двухзонную модель (МДМ), предложенную в [1]. В случае безграничной плоскости собственными функциями гамильтониана МДМ являются плоские волны, амплитуда которых представляет собой двухкомпонентный спинор:

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathcal{N} \begin{pmatrix} 1 \\ b \end{pmatrix} \exp{(i\ \mathbf{pr})}, \qquad (1)$$

где $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ – двумерные координата и импульс электрона, $\mathcal{N}$ – нормирующий множитель, $b = (E - \Delta/2)/(\gamma(\tau p_x - ip_y))$, $E = \sqrt{\Delta^2/4 + (\gamma p)^2}$ – энергия состояния $\mathbf{p}$ в зоне проводимости, Δ и γ – параметры материала: ширина запрещенной зоны и межзонная скорость, соответственно, $\tau = \pm 1$ – долинный индекс. Легко убедиться, что $\mathcal{N}$ не зависит от τ. В длинноволновом пределе $k \ll p \sim p_F$, где k – импульс плазмона (полагаем $\hbar = 1$), p_F – фермиевский импульс, в форм-факторы входят лишь диагональные элементы гриновской функции, содержащие только $|b|^2$, т.е. не зависящие от τ. Поэтому спектр плазмонов содержит только одну ветвь с корневым законом дисперсии $\omega \propto \sqrt{k}$ при малых k, как в электронной 2D системе со стандартным квадратичным по импульсу спектром. Наличие двух долин дает лишь суммарную плотность двух групп электронов в формуле плазменной частоты $\omega(k)$. Такой же результат получается при вычислениях из первых принципов [2].

Положение кардинально меняется в случае ограниченного образца. В предлагаемой работе мы показываем это на примере прямой полосы монослоя ДХМП (насколько нам известно, плазменные колебания в ограниченных образцах ДХМП еще не исследовались).

[1)]e-mail: ritta@isp.nsc.ru; levm@isp.nsc.ru; chaplik@isp.nsc.ru

2. Плазменные волны в полосе ДХПМ. Рассмотрим полосу шириной $L = 2w$, параллельную оси $0y$. Волновые функции электронов определяются гамильтонианом ДХПМ [1] и граничными условиями [3–7]. Для гамильтониана имеем:

$$\hat{\mathcal{H}} = \gamma(\sigma_x \tau \hat{p}_x + \sigma_y p_y) + \frac{\Delta}{2}\sigma_z, \tag{2}$$

где $\sigma_{x,y,z}$ – матрицы Паули.

Собственные функции гамильтониана (2) являются двухкомпонентными спинорами

$$\Psi(x,y) = \tilde{\psi}_\tau(x,p_y)\frac{\exp(ip_y y)}{\sqrt{L_y}};$$
$$\tilde{\psi}_\tau(x,p_y) = N\psi_\tau(x,p_y);\ \ \psi_\tau(x,p_y) = \begin{pmatrix}\psi_{1,\tau}(x,p_y)\\ \psi_{2,\tau}(x,p_y)\end{pmatrix}; \tag{3}$$
$$N = \Big(\int_{-w}^{w} dx|\psi_\tau(x,p_y)|^2\Big)^{-1/2}.$$

Используемые нами граничные условия даются формулами:

$$\psi_1(w) + i\,\tau\psi_2(w) = 0, \ \ \psi_1(-w) - i\,\tau\psi_2(-w) = 0. \tag{4}$$

Эти условия обеспечивают отсутствие вытекающих из полосы токов в любой точке ее границы.

Компоненты спинора $\psi_\tau(x,p)$ состояния с импульсом p вдоль полосы (p – сохраняющаяся величина; далее не пишем у нее индекс y) имеют вид:

$$\psi_{1,\tau}(x,p) = (\cos(\kappa x) + B(\tau,p)\sin(\kappa x));$$
$$\psi_{2,\tau}(x,p) = \frac{i\gamma}{E+\Delta/2}\Big[B\big(p\sin(\kappa x) - \tau\kappa\cos(\kappa x)\big) + $$
$$+ p\cos(\kappa x) + \tau\kappa\sin(\kappa x)\Big], \tag{5}$$

$$B(\tau,p) = \frac{\gamma\kappa\sin(\kappa w) - \big(E+\Delta/2-\tau\gamma p\big)\cos(\kappa w)}{\gamma\kappa\cos(\kappa w) + \big(E+\Delta/2-\tau\gamma p\big)\sin(\kappa w)} \tag{6}$$
$$(\kappa = \sqrt{E^2 - \Delta^2/4 - (\gamma p)^2}/\gamma).$$

Нас интересует частота плазменной волны $\omega(k)$, распространяющейся вдоль полосы, с волновым числом k. Эта частота находится из условия существования нетривиального решения уравнения для фурье-компоненты потенциала волны $\varphi_k(x)$ при $z = 0$, т.е. в плоскости слоя. В пренебрежении запаздыванием ($\omega \ll ck$, где c – скорость света) $\varphi(x)$ удовлетворяет уравнению Пуассона, в правой части которого стоит возмущение плотности заряда электронного газа, вызванное самим потенциалом. В рамках теории линейного отклика возмущение плотности выражается через поляризационный оператор $\Pi_{nm}(\omega,k)$:

$$\Pi_{nm}(\omega,k) = -\sum_p \frac{f(E_n(p)) - f(E_m(p+k))}{E_n(p) - E_m(p+k) + \omega + i\delta}. \tag{7}$$

Здесь $f(E_n(p))$ – фермиевские числа заполнения, $E_n(p)$ – энергия электрона в n-й подзоне размерного квантования. Функции $E_n(p)$ для указанных выше граничных условий определяются корнями уравнения:

$$\frac{\tan(2\kappa w)}{\kappa w} + \frac{2\gamma}{\Delta w} = 0;$$
$$E^2(p) = \Delta^2/4 + \gamma^2(p^2+\kappa^2). \tag{8}$$

Как видим, E не зависит от τ, т.е. электронный спектр в двух долинах одинаков.

Далее, согласно известной схеме, следует записать формальное решение уравнения для $\varphi_k(x)$ через функцию Грина и взять от обеих частей равенства матричные элементы по электронным собственным функциям. При этом получается замкнутая система линейных интегральных уравнений для матричных элементов потенциала плазменной волны. В рассматриваемом здесь случае собственные функции помимо номера подзоны n и импульса p имеют дополнительный индекс $\tau = \pm 1$, а возмущение плотности содержит сумму вкладов обеих долин:

$$\varphi_{n,\tau,;m,\lambda}(p,p+k) =$$
$$= \frac{2e^2}{\varepsilon L_y}\sum_{m',\lambda',n',\tau',p'} \frac{f(E_{m'}(p',p'+k)) - f(E_{n'}(p'))}{E_{m'}(p'+k) - E_{n'}(p') + \omega + i\delta}\times$$
$$\times J_{m,\lambda,n,\tau;m',\lambda',n',\tau'}(p,p')\varphi_{n',\tau',;m',\lambda'}(p'+k). \tag{9}$$

В (9) учтено правило отбора по импульсу вдоль полосы: $p \to p+k$; ε – средняя диэлектрическая постоянная двух сред, разделенных 2D электронным газом.

Входящие в уравнения (9) форм-факторы определяются формулой:

$$J_{m,\lambda,n,\tau;m',\lambda',n',\tau'}(p,p') =$$
$$\int\limits_{-w}^{w}\int\limits_{-w}^{w} dxdx'\tilde{\psi}_{n,\tau}(x,p)^* \cdot \tilde{\psi}_{m,\lambda}(x,p+k)K_0(|k(x-x')|)$$
$$\times\tilde{\psi}_{n',\tau'}(x')^* \cdot \tilde{\psi}_{m',\lambda'}(x',p'+k). \tag{10}$$

Здесь $K_0(|k(x-x')|)$ – функция МакДональда, являющаяся функцией Грина рассматриваемой задачи: частицы движутся в плоскости (x,y), а их плотность зависит только от x.

При неограниченном дискретном спектре число уравнений в (9) а, следовательно, и число ветвей плазмонного спектра также бесконечно. Среди них есть межподзонные плазмоны, спектр которых имеет щель при $k = 0$ и которым соответствуют недиагональные элементы $m \neq n$ в системе (9). Нижней части спектра плазмонов с $\omega \to 0$ при $k \to 0$ отвечают внутриподзонные плазмоны, число ветвей которых в обычном однодолинном полупроводнике равно числу заселенных подзон поперечного квантования в полосе. Именно для длинноволновых низкочастотных плазменных волн в полосе возникает существенная разница между одно- и двухдолинной системами, тогда как в безграничной плоскости, как уже было сказано, в этом же пределе получается качественно одинаковый результат.

В работе [8] исследованы междолинные плазмоны в безграничной плоскости, которые связаны с виртуальными переходами электронов из одной долины в другую. Естественно, это сопровождается большой передачей импульса, т.е. возникает коротковолновый плазмон. Мы обращаем внимане на то, что в плазменной волне долины могут быть связаны не только электронными переходами, но и электрическим полем. В случае длинноволновых колебаний реализуется только вторая возможность, т.е. две группы частиц связаны электрическим полем, а не взаимными обменами (*electrically connected, electronically disconnected*). Близкой аналогией такой связи могут служить плазменные колебания в двух параллельных 2D слоях без учета туннелирования между слоями (см [9]). В нашем случае ключевым фактором является различие форм-факторов диагональных и недиагональных по долинному индексу. Это различие означает разную форму (разную координатную зависимость) возмущений плотности электронов разных долин. Ниже показано, что результатом является дополнительная ветвь плазменных колебаний с линейным законом дисперсии.

3. Внутриподзонные плазмоны низшей подзоны. Рассмотрим простейший случай, когда при нулевой температуре T заселен лишь нижний уровень в зоне проводимости. Тогда в системе (9) следует положить $m = n = m' = n' = 0$. Далее в поляризационных операторах $\Pi_{0,0}(\omega, k)$ разложим разности энергий и фермиевских функций, считая $k \ll p_F$, так как нас интересует предел малых k – начало плазмонного спектра. При $T = 0$ разность $f(E(p)) - f(E(p+k))$ пропорциональна $\delta(E - E_F)$, поэтому интеграл по импульсу сводится к сумме значений подынтегральной функции в точках p_F и $-p_F$ ($E(p)$ четна по p). С учетом суммирования по долинам система двух интегральных уравнений превращается, таким образом, в систему четырех алгебраических линейных уравнений относительно матричных элементов потенциала $\Phi_\tau(p)$, диагональных по долинному индексу: $\Phi_+(p) = \varphi_{0,+1;0,+1}(p;p)$ и $\Phi_-(p) = \varphi_{0,-1;0,-1}(p;p)$ при значениях $p = \pm p_F$ (напомним, что в рассматриваемой длинноволновой области междолинные матричные элементы не дают вклада, и потому опущены). Поляризационные операторы не зависят от τ и отличаются знаком ферми-скорости v_F в точках p_F и $-p_F$: $\Pi(\pm pF) = (\omega \pm kv_F)^{-1}$.

Приведем одно из четырех уравнений:

$$\Phi_+(p_F) = \frac{e^2}{\pi\varepsilon}\Big[\frac{J_{++}(p_F, -p_F)}{\omega - kv_F}\Phi_+(-p_F) - \\ - \frac{J_{++}(p_F, p_F)}{\omega + kv_F}\Phi_+(p_F) + \frac{J_{+-}(p_F, -p_F)}{\omega - kv_F}\Phi_-(-p_F) - \\ - \frac{J_{+-}(p_F, p_F)}{\omega + kv_F}\Phi_-(p_F)\Big]. \quad (11)$$

Остальные три уравнения получаются перебором нижних индексов $\pm$ и аргументов p_F и $-p_F$ в величинах Φ. Форм-факторы $J_{\tau,\tau'}(\xi p_F, \xi' p_F)$, где $\xi, \xi' = \pm 1$ следуют из общих формул (10) при попарном совпадении индексов первого со вторым и третьего с четвертым. Это означает, что в двойной интеграл входят только скалярные квадраты волновых функций (суммы квадратов модулей компонент спиноров $\tilde\psi(x, \tau, p)$). В этой системе фигурируют 16 форм-факторов, которые связаны между собой соотношениями, вытекающими из симметрии структуры (одинаковые границы полосы) и ядра двойного интеграла $K_0(|k(x - x')|)$. Имея явные выражения для волновых функций (3) и (5), нетрудно убедиться, что все форм-факторы разделяются на две группы (по 8 в каждой) равных между собой величин. В итоге остаются лишь два независимых форм-фактора, которые для краткости мы обозначим J_1 и J_2:

$$J_1 = \\ \int_{-w}^{w}\int_{-w}^{w} dxdx' |\tilde\psi_+(x, p_F)|^2 K_0(|k(x - x')|) |\tilde\psi_+(x', p_F)|^2;$$

$$J_2 = \\ \int_{-w}^{w}\int_{-w}^{w} dxdx' |\tilde\psi_+(x, p_F)|^2 K_0(|k(x - x')|) |\tilde\psi_-(x', p_F)|^2. \quad (12)$$

Напоминаем, что под интегралами в (12) стоят скалярные квадраты спиноров $\tilde\psi_\tau(x, p_F)$, равные сумме квадратов модулей компонент $\tilde\psi_{1,\tau}$ и $\tilde\psi_{2,\tau}$, определенных в (5), (6):

$$|\tilde{\psi}_{+1}(x,p)|^2 = N^2\Big\{\Big(\cos(\kappa x) + B(+1,p)\sin(\kappa x)\Big)^2 + \\ + \frac{\gamma^2}{(E+\Delta/2)^2}\Big[B(+1,p)\big(p\sin(\kappa x) - \kappa\cos(\kappa x)\big) + \\ + p\cos(\kappa x) + \kappa\sin(\kappa x)\Big]^2\Big\}; \tag{13}$$

$$|\tilde{\psi}_{-1}(x,p)|^2 = N^2\Big\{\Big(\cos(\kappa x) + B(-1,p)\sin(\kappa x)\big)^2 + \\ + \frac{\gamma^2}{(E+\Delta/2)^2}\Big[B(-1,p)\big(p\sin(\kappa x) + \kappa\cos(\kappa x)\big) + \\ + p\cos(\kappa x) - \kappa\sin(\kappa x)\Big]^2\Big\}. \tag{14}$$

Детерминант системы принимает вид:

$$D = 1 - \frac{4k^2\beta v_F J_1}{\omega^2 - k^2 v_F^2} + \frac{4k^4\beta^2 v_F^2 (J_1^2 - J_2^2)}{(\omega^2 - k^2 v_F^2)^2}, \tag{15}$$

где $\beta = e^2/(\pi\varepsilon)$. Из (15) для плазмонных частот получаем:

$$\omega_1^2 = k^2[v_F^2 + 2\beta v_F(J_1 + J_2)]; \tag{16}$$
$$\omega_2^2 = k^2[v_F^2 + 2\beta v_F(J_1 - J_2)]. \tag{17}$$

В упомянутой выше системе двух параллельных плазменных слоев две ветви колебаний – оптическая ($\omega \propto \sqrt{k}$)) и акустическая ($\omega \propto k$) интерпретируются как синфазные и антифазные колебания плотности заряда в слоях. Нечто аналогичное имеется и в рассматриваемой здесь задаче. В правой части уравнения самосогласованного поля для потенциала плазменной волны стоит неравновесная добавка к плотности заряда, индуцированная этим потенциалом. Парциальный вклад состояния (n,τ,p) в эту добавку пропорционален в рассматриваемом случае $\Phi_\tau(p)$. Из системы четырех уравнений типа (11) можно найти отношение $\Phi_+(p_F)/\Phi_-(p_F)$, зависящее, естественно, от ω и k. Длинное и довольно громоздкое вычисление привело к простому результату: при подстановке $\omega = \omega_1$ $\Phi_+/\Phi_- = +1$, а для ветви ω_2 это отношение равно -1. Таким образом, и здесь наличие двух ветвей можно связать с синфазными и антифазными колебаниями в двух долинах.

При малых k ($kw \ll 1$) функцию $K_0(|k(x-x')|)$ во всей области интегрирования можно заменить ее асимптотическим выражением. С учетом нормировки волновых функций зависимость частот от k полностью определяется. В этом пределе $J_1 = -\ln(|kw|e^C/2) + \overline{J}_1$, $J_2 = -\ln(|kw|e^C/2) + \overline{J}_2$, где $\overline{J}_1$ и $\overline{J}_2$ даются формулами (12), в которых вместо $K_0(|k(x-x')|)$ стоит $\ln(|x-x'|/w)$, C – постоянная Эйлера.

Таким образом, первая ветвь имеет логарифмическую сингулярность при $k = 0$, что соответствует известному закону дисперсии одномерного плазмона при стандартном параболическом спектре электронов [10, 11]. Во второй ветви логарифмические вклады сокращаются и получается линейный закон дисперсии $\omega = sk$ со "скоростью звука" $s = \sqrt{v_F^2 + 2\beta v_F(J_1 - J_2)}$. Численный расчет для MoS_2 дает при $L = 100$ Å, линейной концентрации носителей $N_L = 2.55 \cdot 10^6$ см$^{-1}$, $\varepsilon = 6$ значение скорости $s = 1.0002\, v_F$ ($v_F = 4.472 \cdot 10^6$ см/с). Как видим, s лишь на малую величину превышает скорость Ферми. Эта малость есть следствие малой величины разности $J_1 - J_2$, что обусловлено значениями параметров Δ и γ в монослоях ДХПМ. Для сравнения мы провели аналогичный расчет для щелевого графена на подложке гексагонального нитрида бора при $\Delta = 15$ мэВ (см., например, работу [12]) и тех же значениях ширины полосы и линейной концентрации электронов и получили для скорости во второй ветви $s = 1.28\, v_F$.

Нами была рассмотрена также аналогичная задача при наличии магнитного поля, нормального к плоскости полосы. Как и в безграничной плоскости, нулевой уровень Ландау ($n = 0$) существует только в зоне проводимости при $\tau = -1$ и только в валентной зоне при $\tau = +1$. Остальные уровни в безграничной плоскости дважды вырождены по долинному индексу, а в полосе это вырождение снимается вследствие τ-удвоения. Возникающее расщепление при реально возможных ширинах полосы много меньше расстояния между уровнями Ландау соседних номеров, так что в самой простой из неоднозонных ситуаций уровень Ферми при $T = 0$ лежит между первым и вторым уровнями Ландау (слабо расщепленными), так что заселены три подзоны. В тех же приближениях, что и выше, приходим к бикубическому уравнению на частоту плазменной волны. В асимптотическом пределе малых k можно показать, что это уравнение имеет три вещественных корня: один соответствует 1D плазмону с $\omega^2 \propto k^2 \ln(kw)$, а два других – акустическим ветвям $\omega_{1,2} = s_{1,2}k$.

В заключение еще раз подчеркнем, что принципиально важным для существования междолинных (в указанном выше смысле) длинноволновых плазмонов является размерное квантование поперечного движения электронов как следствие конечного размера системы в этом направлении.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Института физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта.

1. D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng, X. Xu, and W. Yao, Phys. Rev. Lett. **108**, 196802 (2012).
2. K. Andersen and K.S. Thygesen, Phys. Rev. B **88**, 155128 (2013).
3. M.V. Berry and R.J. Mondragon, Proc. R. Soc. London, Ser. A **412**, 53 (1987).
4. F. Qu, A.C. Dias, J. Fu, L. Villegas-Lelovsky, and D.L. Azevedo, Sci. Rep. **7**, 41044 (2017); DOI:10.1038/srep 41044.
5. D. Oliveira, J. Fu, L. Villegas-Lelovsky, A.C. Dias, and F. Qu, Phys. Rev. B **93**, 205422 (2016).
6. P. Recher, B. Trauzettel, A. Rycerz, Ya.M. Blanter, C.W.J. Beenakker, and A.F. Morpurgo, Phys. Rev. B **76**, 235404 (2007).
7. Р.З. Витлина, Л.И. Магарилл, А.В. Чаплик, ЖЭТФ **158**(6), 1175 (2020).
8. H. Dery, Phys. Rev. B **94**, 075421 (2016).
9. Р.З. Витлина, А.В. Чаплик, ЖЭТФ **81**, 1011 (1981).
10. A.V. Chaplik and M.V. Krasheninnikov, Surf. Sci. **98**, 533 (1980).
11. S. Das Sarma and W.Y. Lai, Phys. Rev. B **32**, 1401 (1985).
12. J. Jung, A.M. DaSilvaet, A.H. MacDonald, and Sh. Adam, Nat. Commun. **6**, 6308 (2015).