Rotació de l'estructura cristal·lina del MoS_2

Josep Planelles

October 25, 2019

La figura 1 mostra dues possibles orientacions de la xarxa del MoS_2 i en la figura 2 veiem com és possible retallar un triangle en les xarxes per aconseguir quantum dots triangulars amb frontera zig-zag o arm-chair. També se mostra que una rotació $\pi/3$ de l'estructura cristal·lina del MoS_2 permet passar d'una a un altra orientació i en conseqüència canvia el tipus de frontera, zig-zag o arm-chair, dels quantum dots triangulars.

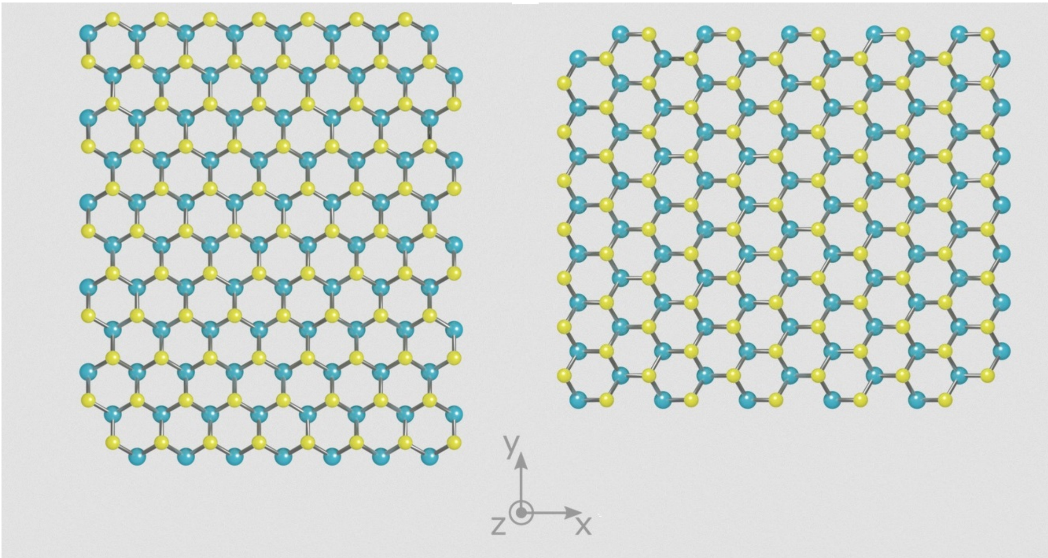

Figure 1: Dues orientacions o perspectives de la xarxa del MoS_2.

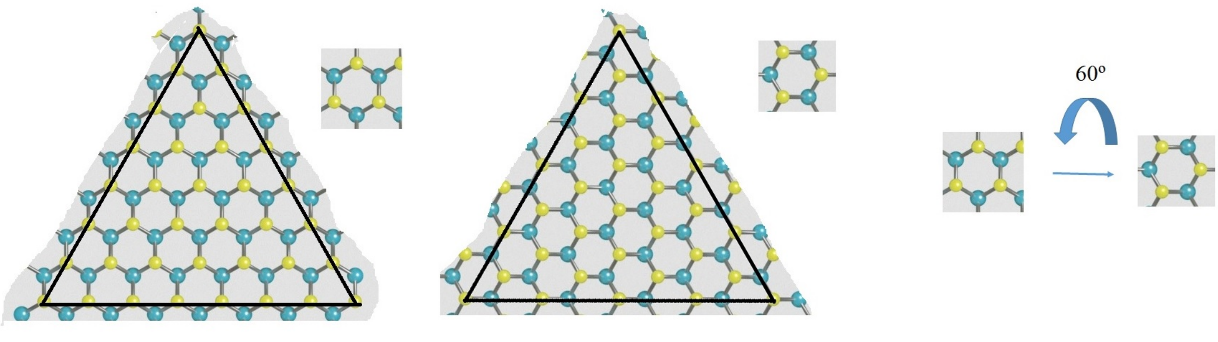

Figure 2: Triangles de MoS_2 amb frontera zig-zag i arm-chair.

A. Kormányos et al.[1] ham obtingut per a aquest compost un Hamiltonià k·p efectiu que incorpora els efectes de espín-òrbita, inclòs el desdoblament (*splitting*) del a banda de conducció.

$$
\begin{aligned}
H_{eff} &= H_0 + H_{as} + H_{3w} + H_{cub} \\
H_0 + H_{as} &= \begin{pmatrix} \epsilon_v & \tau\gamma_3 k_- \\ \tau\gamma_3 k_+ & \epsilon_c \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \alpha k^2 & 0 \\ 0 & \beta k^2 \end{pmatrix} \\
H_{3w} &= \kappa \begin{pmatrix} 0 & k_+^2 \\ k_-^2 & 0 \end{pmatrix} \\
H_{cub} &= -\tau \frac{\eta}{2} k^2 \begin{pmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{1}
$$

on els paràmetres α, β descriuen el trencament de la simetria electró-forat, κ és responsable del *trigonal warping*,$\tau = 1(-1)$ segons ens referim al punt K o el K'. Finalment, el terme H_{cub} és important per aconseguir un ajust quantitatiu de la banda de valència VB fora de les rodalies de K.

Podem reescriure aquest hamiltonià en la forma:

$$
H_{eff} = (\epsilon_v + \alpha k^2)\frac{1}{2}(\mathbb{I} + \sigma_z) + (\epsilon_c + \beta k^2)\frac{1}{2}(\mathbb{I} - \sigma_z) + \tau\gamma_3\ \vec{k_t} \cdot \vec{\sigma_t} + \kappa \begin{pmatrix} 0 & k_+^2 \\ k_-^2 & 0 \end{pmatrix} - \tau \frac{\eta}{2} k^2\ \vec{k_t} \cdot \vec{\sigma_t}
\tag{2}
$$

on $\vec{k_t} = (k_x, k_y)$, $\vec{\sigma_t} = (\sigma_x, \sigma_y)$, amb $\sigma_i, i = x, y, z$ les matrius de Pauli.

Efectuem una rotació d'angle θ al voltant de l'eix z (perpendicular a la xarxa 2D del MoS_2). Si anomenem A'_i a les components del vector A abans d'efectuar la rotació i A_i a les components desprès d'efectuar-la, tenim que $A_z = A'_z$, $A_x = A'_x \cos\theta - A'_y \sin\theta$, $A_y = A'_x \sin\theta + A'_y \cos\theta$, amb $A \equiv \vec{k}$ o $\vec{\sigma}$.

Calculem les rotacions de cada membre en l'equació 2. Els termes $(\epsilon_v + \alpha k^2)$ i $(\epsilon_c + \beta k^2)$ són invariants perquè ho és el quadrat del mòdul del vector $\vec{k_t}$: $k_t^2 = k_x^2 + k_y^2$. El terme $(\mathbb{I} \pm \sigma_z)$ també perquè ho és òbviament la identitat $\mathbb{I}$ i perquè una rotació al voltant de l'eix z no altera σ_z. El terme $\tau\gamma_3\ \vec{k_t} \cdot \vec{\sigma_t}$ també és invariant perquè el producte escalar de dos vectors és invariant a la rotació simultània dels dos vectors que es multipliquen. Amb açò trobem que la part $H_0 + H_{as}$ més important de l'hamiltonià H_{eff} és invariant sota rotacions al voltant de l'eix z.

Considerem el terme $H_{cub} = -\tau \frac{\eta}{2} k^2 \vec{k_t} \cdot \vec{\sigma_t}$. Aquest també és invariant perquè ho són separadament $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ i el producte escalar $\vec{k_t} \cdot \vec{\sigma_t}$. Finalment, considerem el terme de deformació trigonal H_{3w}. Tenint en compte el que hem dit abans de com varien les components dels vectors amb la rotació, desprès d'una poca àlgebra, trobem que:

$$
H_{3w}^{\theta} = \kappa \begin{pmatrix} 0 & (k_x^2 - k_y^2)e^{-3i\theta} + 2i\ k_x k_y e^{3i\theta} \\ (k_x^2 - k_y^2)e^{3i\theta} - 2i\ k_x k_y e^{-3i\theta} & 0 \end{pmatrix}
\tag{3}
$$

que particularitzat a l'angle $\theta = \pi/3$, atès que $e^{\pm i\pi} = -1$, queda:

$$
H_{3w}^{\pi/3} = -\kappa \begin{pmatrix} 0 & k_+^2 \\ k_-^2 & 0 \end{pmatrix} = -H_{3w}
\tag{4}
$$

En resum H_{eff} és invariant sota una rotació $\pi/3$ de l'estructura cristal·lina que converteix triangles amb frontera ziz-zag en triangles amb frontera arm-chair, excepte el terme menor de deformació trigonal H_{3w} que canvia de signe. Per tant, aquest és l'únic terme de H_{eff} que és sensible al canvi de condicions frontera ziz-zag vs. arm-chair. Per tant, podem aplicar a H_{eff} les condicions frontera zig-zag a la vegada que canviem el signe del terme H_{3w} i el resultat hauria de ser el d'aplicar a H_{eff} les condicions frontera arm-chair.

Ara be, hom pot llegir en la literatura[2] que mentre que les condicions frontera zig-zag no mescla els valls K i K', les condicions frontera arm-chair si que els mesclen, encara que la condició per a que hi hagi una mescla completa és que tots el paràmetres de l'hamiltonià siguen iguals en les dos valls,[2] cosa que no és exactament així.[3] En altres paraules, caldria usar l'hamiltonià efectiu 4×4 que té la forma de dos blocs 2×2, cadascun corresponent a una vall[2] i sobre ell aplicar les diferents condicions frontera. Una alternativa més simple que pot capturar la física bàsica del problema és la indicada més amunt: usar l'hamiltonià efectiu 2×2, inclòs el termes de deformació trigonal i aplicar condicions frontera de hard-wall acompanyades del signe adient per a aquest terme, segon siga l'acabament de la frontera zig-zag o arm-chair. Veure el paper de Guinea [4] per a un major aprofundiment en el tema.

References

[1] A. Kormányos, V. Zólyomi, N.D. Drummond, P. Rakyta, G. Burkard, and V.I. Fal'ko, Phys. Rev. B 88 (2013) 045416.

[2] C.G. Péterfalvi, A. Kormányos, and G. Burkard, Phys. Rev. B 92 (2015) 245443. (see pag. 4b)

[3] A. Kormányos, G. Burkard, M. Gmitra, J. Fabian, V Zólyomi, N.D. Drummond, and V. Fal'ko, 2D Mater. 2 (2015) 022001.

[4] H. Rostami,R. Asgari, and F. Guinea, J. Phys. Condens. Matter, 28 (2016) 495001.