

Konstrukcja modeli ciasnego wiązania dla półprzewodnikowych kryształów dwuwymiarowych

K. Sadecka¹, M. Bieniek^{1,2}, A. Wójs¹

¹ *Katedra Fizyki Teoretycznej, Politechnika Wroclawska, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Polska*

² *Department of Physics, University of Ottawa, Ottawa, Ontario, Canada K1N 6N5*

W niniejszej pracy zaprezentowane zostaną wyniki badań dotyczących konstrukcji minimalnych modeli ciasnego wiązania [1] opartych na obliczeniach ab-initio dla dwuwymiarowych kryształów półprzewodnikowych z rodziny MX_2 ($M=Mo, W, X=S, Se, Te$). Ze względu na nowe własności fizyczne, kryształy te potencjalnie mogą zrewolucjonizować przemysł urządzeń optoelektronicznych [2,3,4]. Są one także ciekawe z punktu widzenia badań podstawowych [5], z uwagi na niskoenergetyczną strukturę pasmową opisaną modelem masywnych fermionów Diraca, obecność tzw. dolin pozwalających na selektywne pobudzenie spolaryzowanym kołowo światłem i badanie fizyki spinowo-dolinowo sprzężonych stopni swobody nośników. Interesujące są tam także silne oddziaływania elektronowe prowadzące do ekscytonów o energiach wiązania rzędu 500 meV [6], wykazujących nowe własności topologiczne [7-9].

Przeanalizowane zostaną różne metody dopasowywania wielowymiarowej przestrzeni parametrów Slatera – Kostera do dyspersji i składów orbitalnych uzyskanych metodami ab-initio, m. in. metody liniowe, metoda Powella, metody stochastyczne (Monte Carlo) oraz nowoczesne metody ewolucyjne stosowane w dziedzinie sztucznej inteligencji. Porównane zostaną wydajności wymienionych algorytmów. Następnie przeanalizowana zostanie stosowalność stworzonych modeli ciasnego wiązania do obliczeń własności elektronowych nanostruktur oraz własności optycznych ekscytonów.

[1] M. Bieniek, M. Korkusiński, L. Szulakowska, P. Potasz, I. Ozfidan, and P. Hawrylak, PRB 97, 085153 (2018).

[2] A.K. Geim, I.V. Grigorieva, Nature 499, 419 (2013).

[3] K.F. Mak, D. Xiao, J. Shan, Nat. Photonics 12, 451 (2018).

[4] G. Wang, A. Chernikov, M.M. Glazov, T.F. Heinz, X. Marie, T. Amand, B. Urbaszek, Rev. Mod. Phys. 90, 021001 (2018).

[5] D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng, X. Xu and W. Yao, PRL 108, 196802 (2012)

[6] A. Ramasubramaniam, PRB 86, 115409 (2012)

[7] H. Yu, G.-B. Liu, P. Gong, X. Xu and W. Yao, Nat. Comm. 5, 3876 (2014)

[8] J. Zhou, W.-Y. Shan W. Yao and D. Xiao, PRL 115, 166803 (2015)

[9] A. Srivastava and A. Imamoglu, PRL 115, 166802 (2015)