



Особенности взаимодействия света с наноструктурами графена и дихалькогенидами переходных металлов

С. М. Р. Х. Хуссейн^{1,2}

¹ Самарский национальный исследовательский университет им. академика С. П. Королева, Самара, Россия

² University of Karbala, Karbala, Iraq

Целью данной работы является описание оптических спектров квазиэнергий носителей заряда в дираковском материале. Для достижения поставленной цели в работе решается задача нахождения энергетического спектра вблизи края энергетических зон графена ($\tilde{\Delta}_{so}^c = 0, \tilde{\Delta}_{so}^v = 0$) и вблизи края энергетической зоны дихалькогенида (MoS_2) ($\tilde{\Delta}_{so}^c \neq 0, \tilde{\Delta}_{so}^v \neq 0$), облученных световым полем с высокой энергией фотонов и различной интенсивностью I , где поле линейно поляризовано вдоль оси Y, X . Решение данной задачи дает множество зон, по которым можно определить является ли материал проводником, полупроводником или изолятором.

Ключевые слова: графен, энергия фотона, дихалькогениды переходных металлов, оптический спектр

Статья получена: 18.03.2020

Принята к публикации: 13.05.2020

ВВЕДЕНИЕ

Переходные металлы – это 38 элементов в группах с 3-ей по 12-ую периодической таблицы Менделеева. Монослои дихалькогенидов переходных металлов (TMDC) являются двумерными (2D) полупроводниками. Они нашли широкое применение в электронике и оптике. Многочисленные приложения в электронике обусловлены свойствами прямой запрещенной зоны (в отличие от непрямой).

Features of the Interaction of Light with Graphene Nanostructures and Transition Metal Dichalcogenides

S. M. R. H. Hussein^{1,2}

¹ Samara National Research University named after Academician S. P. Korolev, Samara, Russia

² University of Karbala, Karbala, Iraq

The aim of this work is to describe the optical spectra of the quasi-energies of charge carriers in a Dirac material. To achieve this goal, we solve the problem of finding the energy spectrum near the edge of the energy zones of graphene ($\tilde{\Delta}_{so}^c = 0, \tilde{\Delta}_{so}^v = 0$) and near the edge of the dichalcogenide energy zone (MoS_2) ($\tilde{\Delta}_{so}^c \neq 0, \tilde{\Delta}_{so}^v \neq 0$) irradiated by an electromagnetic field with a high photon energy and various intensities I , where the field is linearly polarized along the Y, X axis; The solution to this problem provides many zones by which it can be determined whether the material is a conductor, semiconductor or insulator.

Keywords: graphene, photon energy, transition metal dichalcogenides, optical spectrum

Received on: 18.03.2020

Accepted on: 13.05.2020

INTRODUCTION

The transition metals are 38 elements in groups from the 3rd to the 12th periodic table. Monolayers of transition metal dichalcogenides (TMDC) are two-dimensional (2D) semiconductors. They are widely used in electronics and optics. Numerous applications in electronics are due to the properties of the direct forbidden zone (in contrast to indirect forbidden zones in three-dimensional layered crystals of TMDCs). Monolayer TMDCs have already been implemented in field effect transistors, logic devices, as well as in optoelectronic devices. The discovery of graphene, a monolayer of

мых запрещенных зон в трехмерных слоистых кристаллах TMDCs). Монослойные TMDC уже были реализованы в полевых транзисторах, логических устройствах, а также в оптоэлектронных приборах. Открытие графена – монослоя атомов углерода с линейной (дираковской) дисперсией электронов [1–3] – инициировало исследования нового класса искусственных наноструктур, известных как дираковские материалы.

Хотя графен сам по себе характеризуется бесщелевым энергетическим спектром электронов, но создание дираковских материалов с широкой запрещенной зоной между валентной и проводящей зонами (дираковские материалы с зазором) сулит большие перспективы для создания оптоэлектронных приборов. Монослои этих материалов эффективно поглощают и генерируют свет. Эти качества важны для создания на основе 2D-материалов из дихалькогенидов переходных металлов (MX_2) элементов оптоэлектроники: перестраиваемых оптических микрорезонаторов для тонкопленочных VCSEL-лазеров и детекторов. Поэтому на их создание были направлены большие усилия. Этим определяется актуальность исследований оптических свойств наноструктур на основе графена и MX_2 .

Энергетический спектр электронов материала описывается параболической функцией вблизи краев зон, но превращается в линейную дираковскую дисперсию, если широкая запрещенная зона исчезает. Таким образом, электронные свойства дираковских материалов с зазором существенно зависят от величины щели и, следовательно, этим определяется их перспективность для нанoeлектронных и оптоэлектронных приложений [4–6].

Не смотря на то, что структуры графена и MoS_2 были в центре внимания в течение длительного времени, математическая квантовая теория для расчета энергетического их спектра в оптических приложениях разработана не была. Поскольку электронная структура дираковских материалов принципиально отличается от традиционных структур материалов в конденсированном состоянии, к дираковским материалам с зазором не может быть непосредственно применена известная теория слабой связи электронов с атомами вещества. Более того, следует отметить, что дираковские материалы с зазором в настоящее время рассматриваются как основа для оптоэлектронных устройств нового поколения. На данный момент существует задача восполнения теории связи. Для ее решения рассматривается слой графена, выращенный на гексагональной подложке из нитрида бора [7, 8].

carbon atoms with a linear (Dirac) dispersion of electrons [1–3], initiated studies of a new class of artificial nanostructures known as Dirac materials.

Although graphene itself is characterized by a gapless energy spectrum of electrons, the creation of Dirac materials with a wide forbidden gap between the valence and conducting bands (Dirac materials with a gap) holds great promise for the development of optoelectronic devices. Monolayers of these materials effectively absorb and generate light. These qualities are important for creating optoelectronic elements based on 2D materials from transition metal dichalcogenides (MX_2): tunable optical microresonators for thin-film VCSEL lasers and detectors. Therefore, great efforts were directed towards their creation. This determines the relevance of studies of the optical properties of nanostructures based on graphene and MX_2 .

The energy spectrum of the electrons of the material is described by a parabolic function near the edges of the bands, but turns into a linear Dirac dispersion if the wide forbidden gap disappears. Thus, the electronic properties of Dirac materials with a gap substantially depend on the size of the gap and, therefore, this determines their prospects for nanoelectronic and optoelectronic applications [4–6].

Despite the fact that the structures of graphene and MoS_2 have been the focus of attention for a long time, a mathematical quantum theory for calculating their energy spectrum in optical applications has not been developed. Since the electronic structure of Dirac materials is fundamentally different from traditional structures of materials in a condensed state, the well-known theory of weak coupling of electrons with atoms of matter cannot be directly applied to Dirac materials with a gap. Moreover, it should be noted that Dirac materials with a gap are currently considered as the basis for a new generation of optoelectronic devices. At the moment, there is the task of completing the theory of communication. To solve it, a graphene layer grown on a hexagonal boron nitride substrate is considered [7, 8].

When studying the interaction of laser radiation with the studied objects, we use the term «strong electromagnetic field». This means that the photon energy of the light field incident on the structure under study should be much larger than the band gap in the source material.

SOLVING THE PROBLEM OF DETERMINING EIGENVALUES BY THE CHOLSKY METHOD

To calculate the optical spectra of charge carriers of the nanostructures under study and their analysis,



При исследовании взаимодействия лазерного излучения с исследуемыми объектами используем термин «сильное электромагнитное поле». Это означает, что энергия фотонов светового поля, падающего на исследуемую структуру, должна быть намного больше, чем ширина запрещенной зоны в исходном материале.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ МЕТОДОМ ХОЛЕЦКОГО

Для расчета оптических спектров носителей заряда исследуемых наноструктур и их анализа нужно найти собственные значения гамильтониана. Воспользуемся стандартным методом Холецкого, так как в этом методе индекс m при разложении функцию Ψ по базисным функциям имеет одно и тоже значение как в цилиндрической системе, так и в сферической системе координат. В обеих системах координат используется одна и также азимутальная координата φ . Так как в этом случае симметрия цилиндрическая и все квантовые точки лежат на оси системы, то нет необходимости использовать теорему сложения для цилиндрических функций.

Нужно найти собственные значения $E(k)$, гамильтониана \hat{H} с собственными функциями Ψ

$$\hat{H}\Psi = E(k)\Psi. \quad (1)$$

Представим функцию Ψ в виде разложения по базисным функциям (в общем случае не ортогональным) $n_1, m_1, p_1=1, 2, 3, \dots$

$$\Psi = \sum f^{n_1} \Phi_{n_1}(x), \quad (2)$$

где Φ – собственная функция гамильтониана. Таким образом, мы можем написать уравнение (2) в следующем виде:

$$\det(H_{n_1}^{n_2} - E(k)S_{n_1}^{n_2}) = 0, \quad (3)$$

где S – скалярное произведение функций. Решение данного уравнения получается только приближенно. Полученные формулы можно применить для расчета спектра носителей заряда в электромагнитном поле как в случае графена, так и дихалькогенидов. Сведем решение этого уравнения к обычной задаче на собственные значения. Запишем уравнение в матричном виде:

$$Hf - ESf = 0. \quad (4)$$

it is necessary to find the eigenvalues of the Hamiltonian. We use the standard Cholesky method, since in this method the index m , when decomposing a function Ψ into basic functions, has the same value both in a cylindrical system and in a spherical coordinate system. Both coordinate systems use the same and azimuthal coordinate φ . Since in this case the symmetry is cylindrical and all quantum points lie on the axis of the system, there is no need to use the addition theorem for cylindrical functions.

We need to find the eigenvalues $E(k)$ of the Hamiltonian \hat{H} with eigenfunctions Ψ

$$\hat{H}\Psi = E(k)\Psi. \quad (1)$$

We represent the function Ψ in the form of expansion in basis functions (in the general case, not orthogonal) $n_1, m_1, p_1=1, 2, 3, \dots$

$$\Psi = \sum f^{n_1} \Phi_{n_1}(x), \quad (2)$$

where Φ is the eigenfunction of the Hamiltonian. Thus, we can write equation (2) in the following form:

$$\det(H_{n_1}^{n_2} - E(k)S_{n_1}^{n_2}) = 0, \quad (3)$$

where S is the scalar product of the functions. The solution to this equation is obtained only approximately. The formulas obtained can be used to calculate the spectrum of charge carriers in an electromagnetic field both in the case of graphene and dichalcogenides. Let us reduce the solution of this equation to the usual eigenvalue problem. We write the equation in matrix form:

$$Hf - ESf = 0. \quad (4)$$

TAKING INTO ACCOUNT THE CONTRIBUTION OF INELASTIC INTERACTION OF LIGHT WITH STRUCTURES

When solving the problem, it is necessary to take into account the contribution of inelastic interaction of light with the structures under study. Let a linearly polarized electromagnetic field fall perpendicular to the monolayer of transition metal dichalcogenide and graphene (Fig. 1).

In contrast to [10], in this work, the spectrum of charge carriers is analyzed based on the solution of the equation:

$$\sum_{j=1}^2 H_{ij}^{(00)} a_j^{(0)} = \tilde{\epsilon}(\vec{k}) a_i^{(0)}. \quad (5)$$

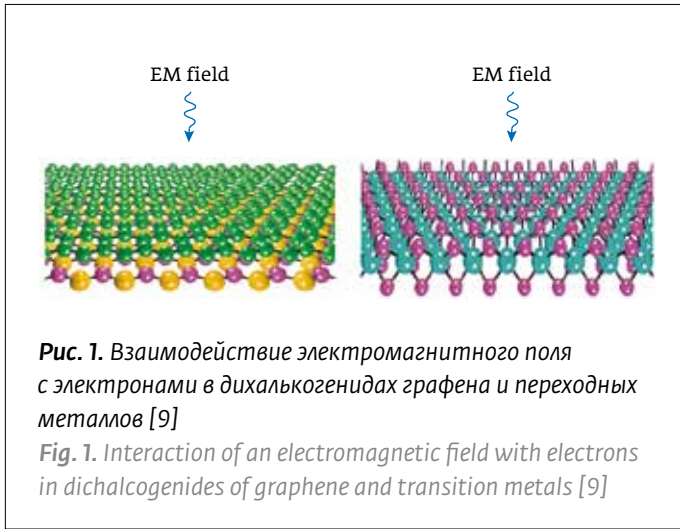


Рис. 1. Взаимодействие электромагнитного поля с электронами в дихалькогенидах графена и переходных металлов [9]

Fig. 1. Interaction of an electromagnetic field with electrons in dichalcogenides of graphene and transition metals [9]

УЧЕТ ВКЛАДА НЕУПРУГОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕТА СО СТРУКТУРАМИ

При решении задачи необходимо учитывать вклад неупругого взаимодействия света с исследуемыми структурами. Пусть линейно поляризованное электромагнитное поле падает перпендикулярно монослою дихалькогенида переходного металла и графена (рис. 1).

В отличие от работы [10] в данной работе анализ спектра носителей заряда производится на основе решения уравнения:

$$\sum_{j=1}^2 H_{ij}^{(00)} a_j^{(0)} = \tilde{\epsilon}(\vec{k}) a_i^{(0)}. \quad (5)$$

Проведем анализ вклада неупругих взаимодействий. Для этого рассмотрим уравнение

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{j=1}^2 H_{ij}^{(nn')} a_j^{(n')} = \tilde{\epsilon}(\vec{k}) a_i^{(n)}. \quad (6)$$

Воспользуемся выражениями матричных элементов стационарного гамильтониана из работы [9, 10] и выражением для гамильтониана из работы [11].

$$H^{(nn')} = \begin{pmatrix} \left[\frac{\epsilon_{ts}^c + \epsilon_{ts}^v}{2} + \gamma \tau k_x + n\omega \right] \delta_{nn'} \left[\frac{\epsilon_{ts}^c + \epsilon_{ts}^v}{2} + i\gamma k_y \right] J_{n'-n}(\Omega\tau), \\ \left[\frac{\epsilon_{ts}^c + \epsilon_{ts}^v}{2} + i\gamma k_y \right] J_{n'-n}(\Omega\tau) \left[\frac{\epsilon_{ts}^c + \epsilon_{ts}^v}{2} - \gamma \tau k_x + n\omega \right] \delta_{nn'} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

Let us analyze the contribution of inelastic interactions. To do this, let us consider the equation

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{j=1}^2 H_{ij}^{(nn')} a_j^{(n')} = \tilde{\epsilon}(\vec{k}) a_i^{(n)}. \quad (6)$$

Let us use the expressions of the matrix elements of the stationary Hamiltonian from [9, 10] and the expression for the Hamiltonian from [11].

$$H^{(nn')} = \begin{pmatrix} \left[\frac{\epsilon_{ts}^c + \epsilon_{ts}^v}{2} + \gamma \tau k_x + n\omega \right] \delta_{nn'} \left[\frac{\epsilon_{ts}^c + \epsilon_{ts}^v}{2} + i\gamma k_y \right] J_{n'-n}(\Omega\tau), \\ \left[\frac{\epsilon_{ts}^c + \epsilon_{ts}^v}{2} + i\gamma k_y \right] J_{n'-n}(\Omega\tau) \left[\frac{\epsilon_{ts}^c + \epsilon_{ts}^v}{2} - \gamma \tau k_x + n\omega \right] \delta_{nn'} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

where $\epsilon_{vb}, \epsilon_{cb}$ is the boundary of the zone;

$\epsilon_{ts}^c = \frac{\Delta_g}{2} + \frac{\tau s \Delta_{so}^c}{2}$, $\epsilon_{ts}^v = \frac{\Delta_g}{2} + \frac{\tau s \Delta_{so}^v}{2}$, $k = (k_x, ik_y)$ is the electronic

wave vector in the plane of the layer, Δ_g is the band gap, γ is a constant proportional to the Fermi velocity of the quasiparticles; Δ_{so}^v and Δ_{so}^c is a spin-orbit splitting of the valence and conduction bands, respectively; $s = \pm 1$ is a spin index; $\tau = \pm 1$ is a valley index corresponding to K and K', respectively [10], $\delta_{nn'}$ is the Kronecker delta, J is the Bessel function of the first kind.

The block matrix of the Hamiltonian has the form

$$H = \begin{pmatrix} H^{-1-1} & H^{-10} & H^{-11} \\ H^{0-1} & H^{00} & H^{01} \\ H^{1-1} & H^{10} & H^{11} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Let us write the matrix taking into account $n_1 n = -1, 0, 1$

$$H = \begin{pmatrix} H_{11}^{-1-1} & H_{12}^{-1-1} & H_{11}^{-10} & H_{12}^{-10} & H_{11}^{-11} & H_{12}^{-11} \\ H_{21}^{-1-1} & H_{22}^{-1-1} & H_{21}^{-10} & H_{22}^{-10} & H_{21}^{-11} & H_{22}^{-11} \\ H_{11}^{0-1} & H_{12}^{0-1} & H_{11}^{00} & H_{12}^{00} & H_{11}^{01} & H_{12}^{01} \\ H_{21}^{0-1} & H_{22}^{0-1} & H_{21}^{00} & H_{22}^{00} & H_{21}^{01} & H_{22}^{01} \\ H_{11}^{1-1} & H_{12}^{1-1} & H_{11}^{10} & H_{12}^{10} & H_{11}^{11} & H_{12}^{11} \\ H_{21}^{1-1} & H_{22}^{1-1} & H_{21}^{10} & H_{22}^{10} & H_{21}^{11} & H_{22}^{11} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

After we have reduced the multidimensional matrix to the usual square one, we can use the standard functions that are available in mathematical packets.

где $\varepsilon_{vb}, \varepsilon_{cb}$ – граница зоны; $\varepsilon_{cs}^c = \frac{\Delta_g}{2} + \frac{\tau s \Delta_{s0}^c}{2}$, $\varepsilon_{ts}^v = \frac{\Delta_g}{2} + \frac{\tau s \Delta_{s0}^v}{2}$,

$k = (k_x, ik_y)$ – электронный волновой вектор в плоскости слоя, Δ_g – ширина запрещенной зоны, γ – константа, пропорциональная скорости Ферми квазичастиц; Δ_{s0}^v и Δ_{s0}^c – спин-орбитальное расщепление валентной зоны и зоны проводимости, соответственно; $s = \pm 1$ спиновой индекс; $\tau = \pm 1$ долиный индекс, соответствующий K и K' соответственно [10], $\delta_{nn'}$ – дельта Кронекера, J – функция Бесселя первого рода.

Блочная матрица гамильтониана имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} H^{-1-1} & H^{-10} & H^{-11} \\ H^{0-1} & H^{00} & H^{01} \\ H^{1-1} & H^{10} & H^{11} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Запишем матрицу $n_i n = -1, 0, 1$ с учетом

$$H = \begin{pmatrix} H_{11}^{-1-1} & H_{12}^{-1-1} & H_{11}^{-10} & H_{12}^{-10} & H_{11}^{-11} & H_{12}^{-11} \\ H_{21}^{-1-1} & H_{22}^{-1-1} & H_{21}^{-10} & H_{22}^{-10} & H_{21}^{-11} & H_{22}^{-11} \\ H_{11}^{0-1} & H_{12}^{0-1} & H_{11}^{00} & H_{12}^{00} & H_{11}^{01} & H_{12}^{01} \\ H_{21}^{0-1} & H_{22}^{0-1} & H_{21}^{00} & H_{22}^{00} & H_{21}^{01} & H_{22}^{01} \\ H_{11}^{1-1} & H_{12}^{1-1} & H_{11}^{10} & H_{12}^{10} & H_{11}^{11} & H_{12}^{11} \\ H_{21}^{1-1} & H_{22}^{1-1} & H_{21}^{10} & H_{22}^{10} & H_{21}^{11} & H_{22}^{11} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

После того как мы свели многомерную матрицу к обычной квадратной, можно использовать стандартные функции, которые имеются в математических пакетах.

Матрицу H можно представить в виде

$$H = S^+ E(k) S \\ S^+ S = I,$$

где диагональная матрица $E(k)$ имеет вид:

$$E(k) = \begin{pmatrix} \varepsilon_-^{-1-1}(k) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_+^{-1-1}(k) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_-^{00}(k) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_+^{00}(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_-^{11}(k) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_+^{11}(k) \end{pmatrix}. \quad (10)$$

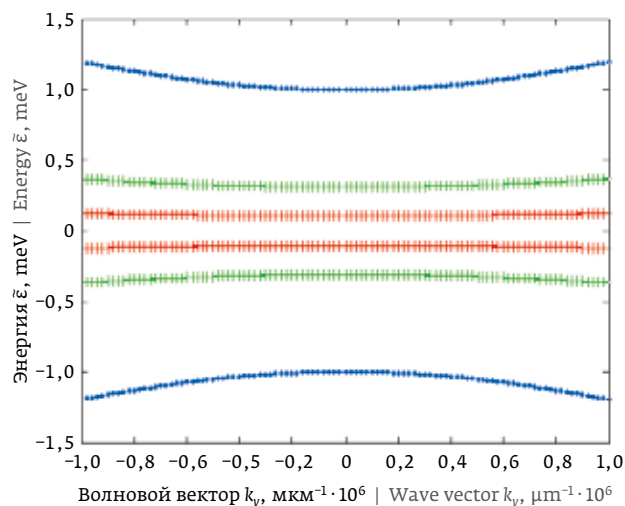


Рис. 2. Энергетический спектр электрона вблизи края зон графена ($\tilde{\Delta}_{s0}^c = 0$, $\tilde{\Delta}_{s0}^v = 0$, $\Delta_g = 2$, $\gamma/h = 10^6$ м/с), облученного калибровочным полем с энергией фотона $h\nu = 10$ мэВ и различной интенсивностью I (I = 0 – синие линии; I = 7,5 кВт/см² – зеленые линии; I = 15 кВт/см² – красные линии; калибровочное поле линейно поляризовано вдоль оси Y)

Fig. 2. Energy spectrum of an electron near the edge of graphene zones ($\tilde{\Delta}_{s0}^c = 0$, $\tilde{\Delta}_{s0}^v = 0$, $\Delta_g = 2$, $\gamma/h = 10^6$ m/s) irradiated by a calibration field with a photon energy $h\nu = 10$ MeV and various intensities I (I = 0 – blue lines; I = 7,5 kW/cm² – green lines; I = 15 kW/cm² – red lines; the calibration field is linearly polarized along the Y axis)

The matrix H can be represented as

$$H = S^+ E(k) S \\ S^+ S = I,$$

where the diagonal matrix $E(k)$ has the form:

$$E(k) = \begin{pmatrix} \varepsilon_-^{-1-1}(k) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_+^{-1-1}(k) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_-^{00}(k) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_+^{00}(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_-^{11}(k) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_+^{11}(k) \end{pmatrix}. \quad (10)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ПРИ НАЛИЧИИ НЕУПРУГИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ДЛЯ ГРАФЕНА И ХАЛЬКОГЕНИДА (MoS_2)

Прежде всего, рассмотрим применение разработанной теории к графену с зазором, предполагая что, $\tilde{\Delta}_{so}^c = 0, \tilde{\Delta}_{so}^v = 0$ во всех производных выражениях. Дисперсия электронов в щелевом графене $\tilde{\epsilon}(k)$ показана на рис. 2 и 3 для частных случаев линейно и циркулярно поляризованных калибровочных полей. В отсутствие падающего поля дисперсия электронов изотропна в плоскости графена (см. сплошные синие линии на рис. 2 и 3).

Однако, линейно поляризованное поле нарушает эквивалентность осей X, Y [см. уравнение (5)]. Как следствие анизотропии электрона, появляется дисперсия вдоль волновых векторов k_x и k_y (см. пунктирные зеленые и красные линии на рис. 2 и 3).

В отличие от поляризации халькогенида (MoS_2) ($\tilde{\Delta}_{so}^c = 3$ мэВ, $\tilde{\Delta}_{so}^v = 147$ мэВ), циркулярно поляризованное калибровочное поле не вызывает анизотропии в плоскости [см. уравнение (6)]. Однако, электронная дисперсия существенно различается для поляризаций по часовой стрелке и против часовой стрелки (см. пунктирные линии на рис. 4 и 5).

Из анализа полученных графических зависимостей видно, что ширина запрещенной зоны и энергетический спектр вблизи края зон графена изменяются при изменении координат вдоль осей X, Y и величины интенсивности падающего светового поля I. Однако, ширина запрещенной зоны и энергетический спектр вблизи края зон дихалькогенида не меняются с изменением координат вдоль осей X, Y. Это означает, что энергетический спектр дихалькогенида остается постоянным, даже при изменении интенсивности в диапазоне значений 0–15 кВт/см². Результаты расчетов предназначены для использования наноструктур графена и MoS_2 в производстве оптических и полупроводниковых приборов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Разработан метод расчета оптических спектров (спектра носителей заряда) в линейном массиве квантовых точек в линейной решетке как для графена, так и для MoS_2 .
- Получены новые уравнения для описания неупругих взаимодействий электромагнитного поля с графеновыми носителями и дихалькогенидными переходными металлами.
- По результатам изучения энергетического спектра и энергетических зазоров можно определить, является ли материал проводником, полупроводником или диэлектриком. Это

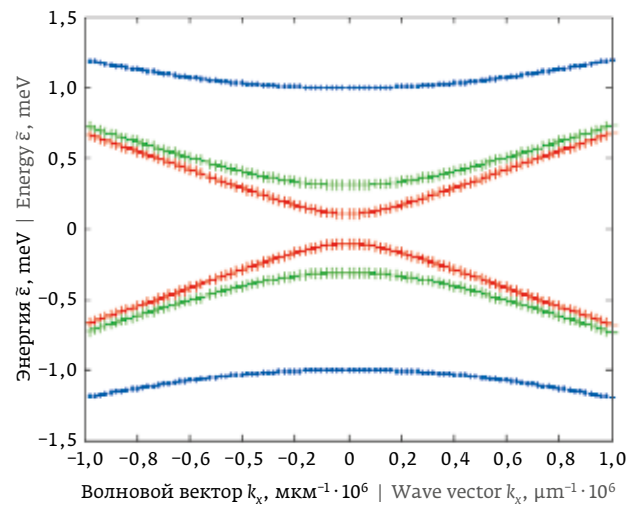


Рис. 3. Энергетический спектр электрона вблизи края зон графена ($\tilde{\Delta}_{so}^c = 0, \tilde{\Delta}_{so}^v = 0, \Delta_g = 2, \gamma/\hbar = 10^6$ м/с), облученного калибровочным полем с энергией фотона $\hbar\nu = 10$ мэВ и различной интенсивностью I (I=0 – синие линии; I=7,5 кВт/см² – зеленые линии; I=15 кВт/см² – красные линии; калибровочное поле линейно поляризовано вдоль оси X)

Fig. 3. Energy spectrum of an electron near the edge of graphene zones ($\tilde{\Delta}_{so}^c = 0, \tilde{\Delta}_{so}^v = 0, \Delta_g = 2, \gamma/\hbar = 10^6$ m/s) irradiated by a calibration field with a photon energy $\hbar\nu = 10$ MeV and various intensities I (I=0 – blue lines; I=7,5 kW/cm² – green lines; I=15 kW/cm² – red lines; the calibration field is linearly polarized along the X axis)

CALCULATION RESULTS IN THE PRESENCE OF INELASTIC INTERACTIONS FOR GRAPHENE AND CHALCOGENIDE (MoS_2)

First of all, we consider the application of the developed theory to graphene with a gap, assuming that $\tilde{\Delta}_{so}^c = 0, \tilde{\Delta}_{so}^v = 0$, in all derived expressions. The electron dispersion in gap graphene $\tilde{\epsilon}(k)$ is shown in Fig. 2 and 3 for special cases of linearly and circularly polarized gauge fields. In the absence of an incident field, the electron dispersion is isotropic in the graphene plane (see solid blue lines in Figs. 2 and 3).

However, a linearly polarized field violates the equivalence of the X, Y axes [see equation (5)]. As a result of electron anisotropy, dispersion appears along the wave vectors k_x and k_y (see the dotted green and red lines in Figs. 2 and 3).

Unlike polarization of chalcogenide (MoS_2) ($\tilde{\Delta}_{so}^c = 3$ meV, $\tilde{\Delta}_{so}^v = 147$ meV), a circularly polarized gauge field does not cause anisotropy in the plane [see equation (6)]. However, electron dispersion differs significantly for polarizations clockwise and counterclockwise (see dotted lines in Figs. 4 and 5).

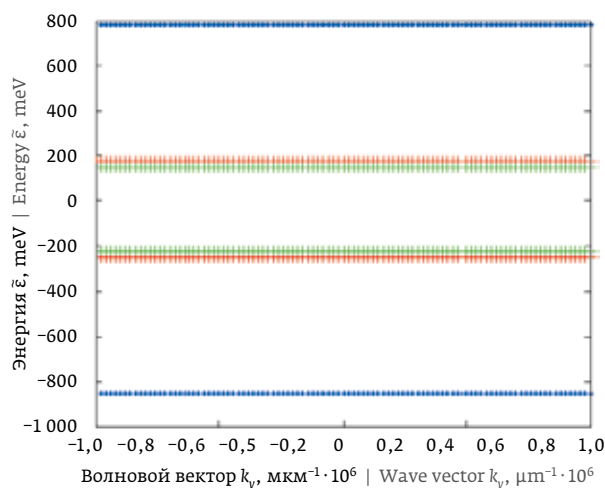


Рис. 4. Энергетический спектр электрона, вблизи края зоны MoS_2 ($\tilde{\Delta}_{s0}^c = 3$ мэВ, $\tilde{\Delta}_{s0}^v = 147$ мэВ, $\Delta_g = 1,58$ мэВ, $\gamma/\hbar = 7,7 \cdot 10^5$ м/с), облученного калибровочным полем с энергией фотона $\hbar\nu = 10$ мэВ и различной интенсивностью I ($I = 0$ – синие линии; $I = 7,5$ кВт/см² – зеленые линии; $I = 15$ кВт/см² – красные линии; калибровочное поле линейно поляризовано вдоль оси Y)

Fig. 4. Energy spectrum of the electron, near the edge of the MoS_2 zone ($\tilde{\Delta}_{s0}^c = 3$ мэВ, $\tilde{\Delta}_{s0}^v = 147$ мэВ, $\Delta_g = 1,58$ мэВ, $\gamma/\hbar = 7,7 \cdot 10^5$ м/с), irradiated with a calibration field with a photon energy $\hbar\nu = 10$ MeV and various intensities I ($I = 0$ – blue lines; $I = 7.5$ kW/cm² – green lines; $I = 15$ kW/cm² – red lines; the calibration field is linearly polarized along the Y axis)

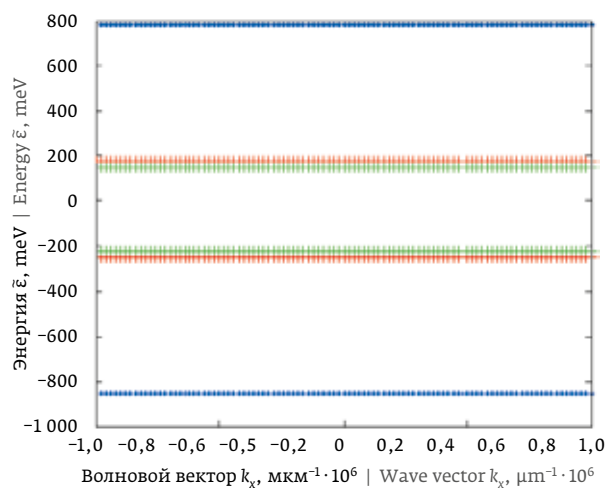


Рис. 5. Энергетический спектр электрона, вблизи края зоны MoS_2 ($\tilde{\Delta}_{s0}^c = 3$ мэВ, $\tilde{\Delta}_{s0}^v = 147$ мэВ, $\Delta_g = 1,58$ мэВ, $\gamma/\hbar = 7,7 \cdot 10^5$ м/с), облученного калибровочным полем с энергией фотона $\hbar\nu = 10$ мэВ и различной интенсивностью I ($I = 0$ – синие линии; $I = 7,5$ кВт/см² – зеленые линии; $I = 15$ кВт/см² – красные линии; калибровочное поле линейно поляризовано вдоль оси X)

Fig. 5. Energy spectrum of the electron, near the edge of the MoS_2 zone ($\tilde{\Delta}_{s0}^c = 3$ мэВ, $\tilde{\Delta}_{s0}^v = 147$ мэВ, $\Delta_g = 1,58$ мэВ, $\gamma/\hbar = 7,7 \cdot 10^5$ м/с), irradiated with a calibration field with a photon energy $\hbar\nu = 10$ MeV and various intensities I ($I = 0$ – blue lines; $I = 7.5$ kW/cm² – green lines; $I = 15$ kW/cm² – red lines; the calibration field is linearly polarized along the X axis)

важно для многих приложений в электронике и оптике, которые связаны с величинами энергетических зон материала и значениями их энергетических щелей.

- Результаты анализа графиков показали, что ширина запрещенной зоны и энергетический спектр вблизи края областей графена изменяются с изменением координаты осей Y, X и интенсивности зондирующего излучения. Но при этом ширина запрещенной зоны и энергетический спектр вблизи края областей MoS_2 не меняются при изменении координат вдоль осей X, Y и интенсивности зондирующего излучения. Это означает, что энергетический спектр MoS_2 остается постоянным, даже если интенсивность зондирующего излучения изменяется (в диапазоне значений 0–15 кВт/см²).

Полученные результаты продемонстрировали, что MoS_2 является перспективным материалом для создания элементов современной оптоэлектроники с фиксированными характеристиками. Наши резуль-

An analysis of the obtained graphical dependences shows that the band gap and the energy spectrum near the edge of the graphene zones change with changing coordinates along the X, Y axes and the intensity of the incident light field I . However, the band gap and the energy spectrum near the edge of the dichalcogenide zones do not change with coordinates along the X, Y axes. This means that the energy spectrum of the dichalcogenide remains constant, even when the intensity changes in the range of 0–15 kW/cm². The calculation results are intended for the use of graphene and MoS_2 nanostructures in the manufacture of optical and semiconductor devices.

CONCLUSION

- A method has been developed for calculating optical spectra (spectrum of charge carriers) in a linear array of quantum dots in a linear lattice for both graphene and MoS_2 .
- New equations for describing inelastic interactions of electromagnetic fields with graphene carriers and dichalcogenic transition metals.

таты совпадают с результатами других авторов [9–11], которые исследовали возможности управления свойствами графена путем изменения осей или интенсивности падающего излучения. Эти свойства исследуемых материалом определяют их перспективность для оптоэлектроники. Как MoS_2 , так и графен имеют перспективы применения для создания перестраиваемых оптических микрорезонаторов, которые являются частью оптоэлектронных приборов: тонкопленочных VCSEL-лазеров и детекторов.

REFERENCES

1. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*. 2004; 306: 666.
2. Castro-Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S., Geim A. K. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.* 2009; 81: 109.
3. S. Das Sarma, Adam S., Hwang E. H., Rossi E. Electronic transport in two-dimensional graphene. *Rev. Mod. Phys.* 2011; 83: 407.
4. Ferrari A. et al. Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems. *Nanoscale*. 2015; 7: 4598.
5. Lensky Y. D., Song J., Samutpraphoot P., Levitov L. S. Topological Valley Currents in Gapped Dirac Materials. *Phys. Rev. Lett.* 2015; 114: 256601.
6. Novoselov K. S., Mishchenko A., Ca, rvalho A., Castro-Neto A. H. 2D materials and Van der Waals heterostructures. *Science*. 2016; 353: aac9439.
7. Sachs B., Wehling T. O., Katsnelson M. I., Lichtenstein A. I. Adhesion and electronic structure of graphene on hexagonal boron nitride substrates. *Phys. Rev. B*. 2011; 84: 195414.
8. Jung J., DaSilva A. M., MacDonald A. H., Adam S. Origin of band gaps in graphene on hexagonal boron nitride. *Nat. Commun.* 2015; 6: 6308.
9. Kormanyos A., Burcard G., Gmitra M. et al. KP theory for two dimensional transition method metal dichalcogenide semiconductors. *2D materials*. 2015; № 2: P022001.
10. Kibis O. V., Dini K., Iorsh I. V., Shelykh I. A. All-optical band engineering of gapped Dirac materials. *Phys. Rev. B*. 2017; 95(12): 125401. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.125401.
11. Kormányos A., Zólyomi V., Drummond N. D., Burkard G. Spin-orbit coupling, quantum dots, and qubits in monolayer transition metal dichalcogenides. *Physical Review X*. 2014; 4(1): 011034. DOI: 10.1103/Phys. RevX.4.011034.

АВТОР

Хуссейн Сафаа Мохамед Ридха Хуссейн, аспирант, e-mail: safaa_m333@yahoo.com, Самарский национальный исследовательский университет им. академика С. П. Королёва, Самара, Россия; University of Karbala, Karbala, Iraq.
ORCID: 0000-0001-6022-0548

- Based on the results of studying the energy spectrum and energy gaps, it can be determined whether the material is a conductor, semiconductor or dielectric. This is important for many applications in electronics and optics, which are associated with the values of the energy zones of the material and the values of their energy gaps.
- The results of the analysis of the graphs showed that the band gap and the energy spectrum near the edge of the graphene regions change with a change in the coordinate of the Y, X axes and the intensity of the probe radiation. But at the same time, the band gap and the energy spectrum near the edge of the MoS_2 regions do not change when the coordinates along the X, Y axes and the intensity of the probe radiation change. This means that the energy spectrum of MoS_2 remains constant, even if the intensity of the probe radiation varies (in the range of 0–15 kW/cm²).

The results showed that MoS_2 is a promising material for creating elements of modern optoelectronics with fixed characteristics. Our results coincide with those of other authors [9–11], who investigated the possibility of controlling the properties of graphene by changing the axes or the intensity of the incident radiation. These properties of the material studied determine their promise for optoelectronics. Both MoS_2 and graphene have application prospects for creating tunable optical microresonators that are part of optoelectronic devices: thin-film VCSEL lasers and detectors.

AUTHOR'S INFORMATION

Hussain Safaa Mohammed Ridha Hussain, graduate student, Samara National Research University named after Academician S. P. Koroleva (443086, Samara, Russia); University of Karbala (56001, Karbala, Iraq). E-mail: safaa_m333@yahoo.com.
ORCID: 0000-0001-6022-0548



Вакуумное оборудование для оптики и микроэлектроники



Проектирование и производство вакуумных напылительных установок «под ключ»



Программное обеспечение и автоматизация



Изготовление технологических устройств



Izovac

Разработка и изготовление тонкопленочных изделий

Разработка технологий формирования тонких пленок

Оптические элементы

Напылительный сервис

Сложные и уникальные покрытия

ООО «Изовак», ул. М. Богдановича, 155-907, 220040, Минск, Беларусь, тел.: +375 17 293 18 42, факс: +375 17 2931845

www.izovac.com
www.izovac-coatings.com