

Raport științific

Cod depunere: PN-III-P1-1.1-TE-2019-04233

Proiect: 2DTMD

Contract: TE98

Etapa 2

Cuprins

Rezumatul etapei.....	2
Obiectiv 2.....	2
Act 2.2.....	2
Simulări ab initio TMD + CDW.....	2
Act 2.3.....	3
Modele efective TMD + CDW.....	3
Obiectiv 3.....	4
Act. 2.4.....	5
Teorie generală și model numeric pentru sisteme dublu strat rotite.....	5
Modelare de grafenă rotită dublu strat.....	7
Modelare de dicalcogenuri de metale de tranziție.....	9
Studiu de sistem dublu strat rotit din MoS ₂	10
Studiu de sistem dublu strat rotit din MoTe ₂	12
Alte activități la Obiectivele 2 și 3.....	13
Act. 2.1.....	13
Act. 2.5. Diseminare.....	13
Publicații.....	13
Prezentări orale.....	13
Postere.....	14
Bibliografie.....	14

Rezumatul etapei

În această etapă am tratat obiectivele 2 și 3 din proiect. La obiectivul 2, am modelat *ab initio* structura de NbSe₂ sub efectele de undă de densitate de sarcină (charge density waves, CDW). Am construit modele efective care includ un potențial CDW asupra unor modele de legături electronice tari care modelează banda de conducție în NbSe₂. La obiectivul 3, am considerat modele dublu strat pentru materiale bidimensionale de tip grafenă și dicalcogenuri de metale de tranziție (transition metal dichalcogenides, TMD). Am dezvoltat o metodă numerică ce permite calculul rapid al spectrului electronic în aceste modele. Am testat în detaliu metoda pe diferite modele de grafenă dublu strat și am ilustrat posibilitatea de a obține benzi plate. Am propus și demonstrat posibilitatea de a utiliza extensia funcțiilor de undă în spațiul reciproc pentru a determina trunchierea necesară a rețelei Bravais. În final am aplicat metoda la TMD-uri. Pentru un model de MoS₂ am arătat rolul cuplajului spin-orbită unor ridicarea unor degenerări de spin în spectru, iar în MoTe₂ am arătat formarea de benzi înguste la nivelul Fermi, obținute doar din modularea potențialului intra-strat datorat structurii de tip moiré.

Obiectiv 2

Determinare efectelor de undă de densitate de sarcina în joncțiuni Josephson din NbSe₂.

Act 2.2

Investigare *ab initio* a structurii electronice de NbSe₂. Construcția de modele efective tight-binding pentru NbSe₂ pe baza modelelor *ab initio*. Construcția de Hamiltonieni efectivi continui pentru calculul analitic al proprietăților sistemului.

Simulări ab initio TMD + CDW

Pentru simularea CDW am utilizat un model care generează fluctuații de sarcină prin perturbarea pozițiilor atomice în rețea. Densitatea de electroni în spațiul real este calculată utilizând teoria funcționalei de densitate (DFT). Calculele au fost făcute utilizând condiții la limită periodice, cu metodologia bazată pe Siesta [1–3]. Ca și regulă generală am utilizat baze de tip DZP, iar ca funcțională am folosit PBEsol [4] (i.e. adaptarea PBE pentru solid.)

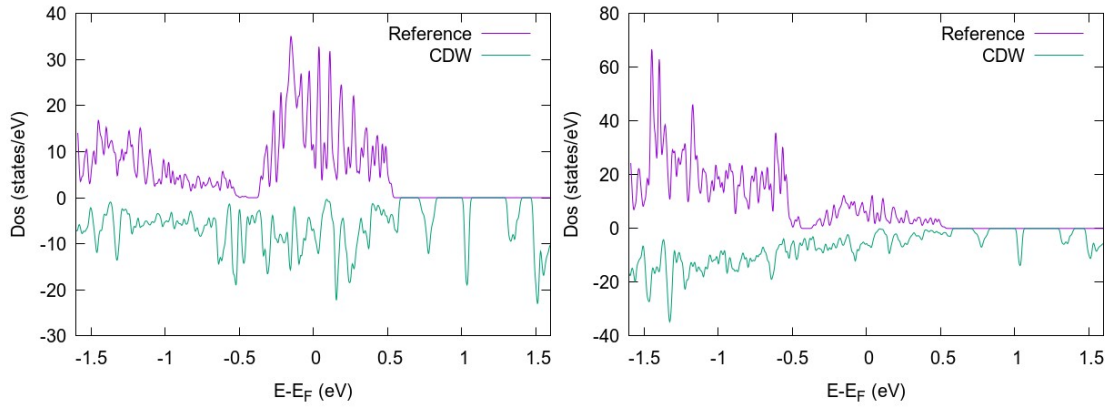


Fig. 1. Densitatea de stări proiectată pe atomii de Nb (dreapta) respectiv Se (stânga) în structura de referință (fără CDW) respectiv în structura perturbată (CDW).

Modelul geometric este bazat pe o supercelulă 4×4 , generată din date experimentale. Perturbarea pozițiilor atomice se face impunând condiții la limită la marginile supercelulei. Am utilizat o funcție de tip cos, noile poziții, x_n fiind: $x_n = x_i + A \cos(2\pi x_i/D)$ unde x_i este poziția inițială, A , amplitudinea perturbației spațiale, D dimensiunea supercelulei de-a lungul coordonatei x . În cazul concret, utilizat pentru simularea CDW în NbSe_2 , deformarea maximă a fost $A = 0.4\text{\AA}$, iar dimensiunea supercelulei pe axa x : $D = 13.675\text{\AA}$.

Densitățile de stări proiectate pe atomii de Nb, respectiv Se, sunt prezentate în Fig. 1. Se remarcă faptul că efectul perturbator induce stări în banda interzisă de deasupra nivelului Fermi. De asemenea, acest efect se produce prin diminuarea cu câteva procente a densității de stări la nivelul Fermi.

Punerea în evidență a fluctuațiilor de sarcină a fost făcută prin simularea de imagini STM. Aceasta a fost făcută în aproximația Tersoff-Hamman [5]. Imaginile au fost obținute prin simulări la densitate constantă, pentru valori de 10^{-6} , 10^{-7} și respectiv 10^{-8} . Atomii din suprafață sunt situați la aproximativ 4.6\AA .

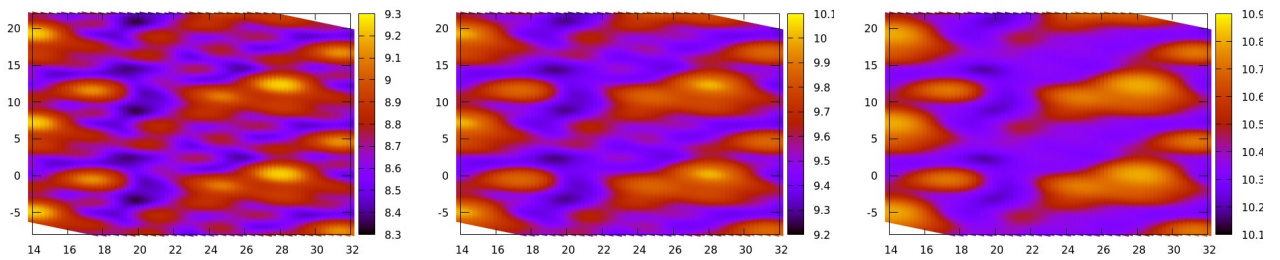


Fig. 2. Imaginea STM calculată pentru suprafața de NbSe_2 în prezența deformărilor structurale. De la stânga la dreapta, valorile conturului sunt 10^{-6} , 10^{-7} și respectiv 10^{-8} .

În figurile 2, respectiv 3 sunt comparate imaginile obținute pentru suprafața ideală (i.e. fără perturbații), respectiv cu perturbații (i.e. corespunzând comparațiilor pentru densitatea de stări din Figura 1). Se poate remarca efectul perturbației periodice asupra imaginii STM la toate valorile densității scanate. De asemenea se remarcă modificarea cu 0.5\AA a înălțimii maxime de scanare între suprafața deformată/nedeformată, pentru toate modelele.

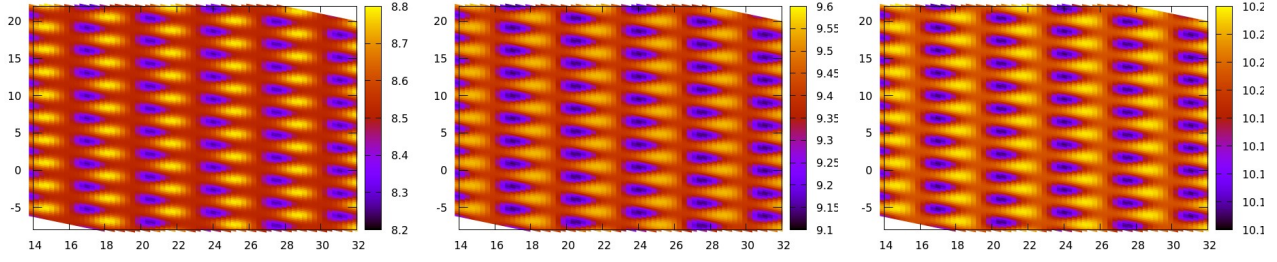


Fig. 3. Imaginea STM calculată pentru suprafața de NbSe₂ ideală. De la stânga la dreapta, valorile conturului sunt 10^{-6} , 10^{-7} și respectiv 10^{-8} .

Act 2.3

Tratament de tip câmp mediu pentru undele de densitate de sarcină.

Modele efective TMD + CDW

Aceste studii *ab initio* sunt complementate cu studii de modele efective pentru efectele de tip CDW. În modele de tip legături electronice tari, cuplajul rețelei cu fononii dă naștere undelor de densitate de sarcină. Efectul este obținut dintr-un hamiltonian de tip Fröhlich care modelează explicit un cuplaj linear între gradele de libertate fononice și electronice [6]. După ce integrăm explicit gradele de libertate fononice, obținem un hamiltonian pur electronic:

$$H = H_{\text{TMD}} + H_{\text{CDW}}, \quad H_{\text{CDW}} = \sum_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}}^{\dagger} V(\mathbf{r}) c_{\mathbf{r}},$$

unde H_{TMD} este hamiltonianul convențional ce modelează benzile electronice pentru TMD, iar H_{CDW} este datorat interacțiunii cu fononii. Ultimul termen este modelat sub forma unui potențial chimic care acționează pe fiecare atom din rețea. H_{TMD} îl reprezentăm printr-un model efectiv de NbSe₂, pentru electronii din banda de conducție, dezvoltat de noi [7] pe o rețea triunghiulară corespunzătoare atomilor de Nb,

$$H_{\text{TMD}} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} (\xi_{\mathbf{k}} \sigma_0 + g_{\mathbf{k}} \sigma_z) c_{\mathbf{k}}.$$

Deoarece modelul NbSe₂ fără efecte CDW este invariant la translație, am scris hamiltonianul în spațiul impulsului \mathbf{k} , unde avem operatori de creație și anihilare, $c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ și $c_{\mathbf{k}}$ cu structură spinorială și care acționează în spațiul matricilor Pauli σ . Energia cinetică a electronilor $\xi_{\mathbf{k}}$ și termenul de cuplaj spin-orbită Ising $g_{\mathbf{k}}$ sunt

$$\begin{aligned} \xi_{\mathbf{k}} = & \mu + 2t_1[\cos(2\alpha) + 2\cos(\alpha)\cos(\beta)] + 2t_2[\cos(2\beta) + 2\cos(3\alpha)\cos(\beta)] \\ & + 2t_3[\cos(4\alpha) + 2\cos(2\alpha)\cos(2\beta)] + 2t_5[\cos(6\alpha) + 2\cos(3\alpha)\cos(3\beta)] \\ & + 4t_4[\cos(\alpha)\cos(3\beta) + \cos(4\alpha)\cos(2\beta) + \cos(5\alpha)\cos(\beta)], \end{aligned}$$

$$g_{\mathbf{k}} = 2\lambda_1[\sin(2\alpha) - 2\sin(\alpha)\cos(\beta)] + 2\lambda_2[\sin(4\alpha) - 2\sin(2\alpha)\cos(2\beta)],$$

unde $\alpha = k_x a/2$ și $\beta = \sqrt{3}k_y a/2$ sunt impulsuri.

Tabel 1. Parametrii modelului efectiv de NbSe₂ în electronvolți.

μ	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	λ_1	λ_2
0.023	0.0134	0.097	0.0066	-0.0102	-0.0144	0.0163	0.0013

Termenul de spin-orbită realizează o ridicare a degenerării stărilor electronice caracteristică benzii de la nivelul Fermi în NbSe₂. Parametrii modelului (vezi tabelul 1) au fost obținuți prin aproximarea modelului de legături electronice tari cu metoda celor mai mici pătrate pe spectrele obținute în DFT.

În acest model, considerăm efecte de tip CDW datorate unui potențial [8]

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \left[2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}q}{2}(x - x_0)\right) \cos\left(\frac{q}{2}\right) + \cos(q(y - y_0) + \phi_3) \right].$$

Pozițiile atomilor sunt descrise de coordonatele (x, y) , cu (x_0, y_0) o deviație de la comensurabilitate indusă de CDW, ϕ_3 o fază totală și $qa = 4\pi/3\sqrt{3}$ distanța de la centrul zonei Brillouin la unul din punctele K . În Fig. 4, reprezentăm un potențialul CDW pe o rețea efectivă de NbSe₂ și vedem direct efectele de modulare de sarcină precum și deviația de la comensurabilitate pentru $(x_0, y_0) = (0.5, 0.5)a$, $\phi_3 = 0.5$, cu $a = 0.334$ nm. Amplitudinea potențialului este reprezentată în unități de V_0 , și este aproximată din experimente ca fiind de ordinul -30 meV.

În faza următoare vom introduce în model corelații supraconductoare și impurități magnetice pe substrat. Vom urmări efectul combinat al undelor de densitate de sarcină și al stărilor legate Yu-Shiba-Rusinov, induse de impurități, în determinarea unor posibile faze topologice supraconductoare.

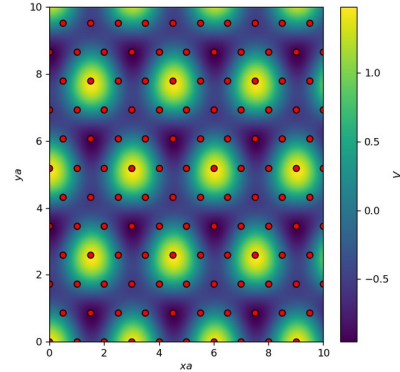


Fig. 4. Potențial CDW pe un model efectiv de NbSe₂ (rețea triangulară definită de punctele roșii) pentru parametrii menționați în text.

Obiectiv 3.

Investigare de joncțiuni Josephson în dicalcogenuri dublu strat.

Act. 2.4

Sarcina 3.1. Determinarea structurii electronice de banda într-un sistem de dicalcogenuri de metale de tranziție. Modele efective lângă suprafața Fermi. Determinarea cuplajului dintre straturi în funcție de unghiul dintre ele.

Teorie generală și model numeric pentru sisteme dublu strat rotite

Sistemele de tip dublu strat au devenit un obiect de interes în comunitatea de materie condensată odată cu descoperirea supraconductibilității în foi rotite de grafenă la unghiul magic de aproximativ 1.1° [9]. La baza acestor descoperiri stă o predicția teoretică [10] a unor benzi plate în straturi duble de grafenă. Aceasta înseamnă că interacțiunile coulombiene vor domina energia cinetică și, prin urmare, este de așteptat prezența unor faze electronice puternic corelate [11,12]. Scopul nostru aici este să investigăm sisteme similare alcătuite din straturi de dicalcogenuri de metale de tranziție. Obiectul nostru de interes sunt TMD-uri de tip MoS₂, MoTe₂, NbSe₂ etc. Un strat bidimensional al acestor TMD-uri este alcătuit mai precis dintr-un „sandwich” de trei straturi diferite de grosimea unui atom, fiecare alcătuit o rețea triangulară. Două straturi de calcogen încapsulează un strat de metal de tranziție. Structura celulei unitate este trigonal prismatică. Sistemele dublu strat TMD sunt formate de două astfel de straturi compuse între care există interacțiuni slabe van der Waals.

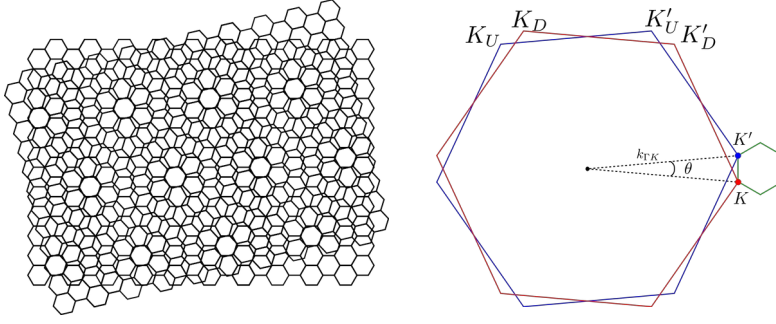


Fig. 5 (Stânga) Structură tipică de tip moiré realizată într-un strat dublu de grafenă prin introducerea unui unghi relativ între straturi. (Dreapta) Zonele Brillouin pentru fiecare strat de grafenă în parte (albastru, stratul de sus, U și roșu, stratul de jos, D), rotite cu un unghi relativ mic θ . Punctele $K_U^{(j)}$ și $K_D^{(j)}$ aparțin zonei Brillouin din grafenă pentru stratul de sus și de jos. Formarea mini-zonei Brillouin moiré (verde) de dimensiune liniară $\sim \theta$ cu punctele K și K' [aplicabil și la TMD-urile considerate].

La unghi θ mic între straturile de grafenă sau de TMD se formează o structură periodică de perioadă lungă $a \sim 1/\theta$. În Fig. 5 (stânga) se vede o structură tipică modelului moiré care se formează în straturile rotite de grafenă. Pentru a înțelege structura se pornește de la descrierea straturilor decuplate. În fiecare strat se consideră teorema Bloch care determină structura de tip undă plană (cu o parte periodică dată de structura cristalină a rețelei) a funcțiilor de undă în stratul respectiv. O transformată Fourier determină în spațiul impulsurilor zona Brillouin în fiecare strat. Rotația din spațiul real se traduce într-o rotație cu același unghi a zonelor Brillouin în fiecare strat. Periodicitatea modelului moiré din spațiul real se traduce prin crearea unei mini-zone Brillouin moiré (mBZ) de formă hexagonală cu o latură $k_\theta \simeq k_{\Gamma K}\theta$, unde $k_{\Gamma K}$ este distanța în spațiul impulsului de la centrul zonei Brillouin la punctele $K_{U/D}$ de la marginea zonei Brillouin într-un strat de grafenă separat [vezi Fig. 5(dreapta) care este aplicabilă atât pentru grafenă, cât și pentru TMD-urile considerate].

Atât pentru grafenă, cât și pentru TMD-uri, modelul electronic pentru întregul sistem dublu strat trebuie să cuprindă și termenii de cuplaj între straturi,

$$H = \begin{pmatrix} H_{UU} & H_{UD} \\ H_{DU} & H_{DD} \end{pmatrix},$$

unde $H_{UD/DU}$ descriu cuplajul dintre cele două straturi (U [up] denotă stratul de sus și D [down], stratul de jos). La energie joasă un set restrâns de stări electronice lângă energia Fermi sunt necesare pentru a descrie fizica. În cazul grafenei, al MoS_2 dopat în banda de conducție, MoTe_2 etc., acestea sunt stările lângă punctele $K_{U/D}$ și $K'_{U/D}$ în zona Brillouin. La energie joasă și unghi de rotație mic, stările între cele două puncte sunt practic decuplate, și este suficient să considerăm doar un astfel de punct, e.g. $K_{U/D}$. Acum considerăm cuplajul dintre funcții de undă între două straturi diferite. La unghi mic se realizează doar cuplaje între stările la K_U și K_D adiacente în spațiul impulsului [Fig. 5(dreapta)]. Termenii de cuplaj sunt dominați de contribuția din cazurile când atomii dintre cele două straturi sunt plasați aproximativ unul deasupra celuilalt, astfel încât tunelarea dintre straturi este facilitată. Deoarece distanța dintre straturi este de obicei mai mare ca distanța dintre atomii din strat, doar primele componente Fourier pentru termenii $H_{UD}(\mathbf{r})$ sunt importante. Termenii de cuplaj între straturi conțin astfel doar transferuri între K_U și K_D , cu un impuls de amplitudine

$$k_\theta = 2 \sin \frac{\theta}{2} k_{\Gamma K} \simeq \theta k_{\Gamma K},$$

în aproximația unghiului mic. Datorită periodicității mBZ trebuie să luăm în seamă aceste salturi electronice modulo vectorii primitivi ai mBZ, \mathbf{G}_1 și \mathbf{G}_2 . Acestea sunt exemplificate în cazul de grafenă dublu strat unde hamiltonianul devine

$$H_{\mathbf{G}_1\mathbf{G}_2}(\mathbf{k}) = v_F \delta_{\mathbf{G}_1\mathbf{G}_2}(\mathbf{k} - \mathbf{G}_1) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \sum_{j=1}^3 (\delta_{\mathbf{G}_1-\mathbf{G}_2, \mathbf{q}_j} + \delta_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1, \mathbf{q}_j}) T_j \quad (1)$$

cu \mathbf{q}_j , trei vectori permiși de simetrie, care conectează punctele K și K' adiacente în mBZ, și care au amplitudine k_θ . Primul termen este termenul obișnuit care provine din dinamica electronică într-un singur strat de grafenă și descrie salturile între atomii A și B din celula unitate cu ajutorul vectorului de matrici Pauli $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$. Al doilea termen descrie dinamica dintre straturi cu matrici [13]

$$T_j = w_0 \sigma_0 + w_1 [\cos \frac{2\pi}{3} (j-1) \sigma_x + \sin \frac{2\pi}{3} (j-1) \sigma_y],$$

unde w_0 descrie amplitudinea integralei de suprapunere între atomi AA din straturi diferite, iar w_1 , între atomi AB din straturi diferite.

Teoria generală trebuie acum implementată în particular în modele numerice care să permită calculul spectrului exact la energie joasă. Mai sus vedem cum pentru fiecare impuls \mathbf{k} este necesar calculul unei matrici de dimensiune infinită datorită faptului că avem o rețeaua Bravais infinită în spațiul impulsului. În practică trebuie să impunem o *limită* în spațiul impulsului, condiția fiind ca spectrul să converge la o formă stabilă când creștem sistemul peste limita respectivă. În cele ce urmează noi propunem să testăm direct aceasta prin stabilirea limitei conform cu un principiu nou: *funcția de undă trebuie să fie reprezentată compact pe un număr finit de mini-zone Brillouin (mBZ)*.

Pentru a simula modelele avem nevoie de definirea unei rețele în spațiul impulsului, definită de \mathbf{G}_1 și \mathbf{G}_2 . Pentru aceasta am utilizat KWANT, un pachet Python pentru transport cuantic [14], care permite descrierea transportului în rețele de atomi în spațiul real. Noi am rescris codul pentru a reprezenta transferul de impuls în rețeaua Bravais a spațiului reciproc. Punctele în rețeaua aleasă sunt definite cu ajutorul unor numere întregi m și n :

$$\mathbf{K}_{mn} = m\mathbf{G}_1 + n\mathbf{G}_2, \quad \mathbf{G}_1 = \frac{k_\theta}{2}(\sqrt{3}, 3), \quad \mathbf{G}_2 = \frac{k_\theta}{2}(-\sqrt{3}, 3).$$

Aceasta este valabil și pentru grafenă cât și pentru TMD-urile considerate. Se consideră în jurul punctului (0,0) al rețelei un mBZ arbitrar în care căutăm să determinăm spectrul. Pentru a reproduce exact spectrul în această zonă Brillouin vom trunchia rețeaua infinită prin alegerea unui set finit de numere (m, n) astfel încât $|\mathbf{K}_{m,n}| < r_k$, unde r_k este o rază definită de la originea spațiului reciproc. Această trunchiere produce o rețea aproximativ circulară cu multe mBZ care înconjoară un mBZ central care este studiat. Raza r_k este ajustată astfel încât funcțiile de undă la energie joasă să aibă suport compact în această rețea reciprocă finită (e.g Fig. 8 sau 11).

Odată ce avem definită rețeaua, putem exporta rețeaua cu hamiltonianul definit pe ea sub forma unei matrici și putem calcula prin diagonalizare exactă, cu pachete de algebră lineară incluse în Numpy și Scipy, valorile proprii ale acestui hamiltonian la orice punct \mathbf{k} în această rețea. În practică, pentru a obține un spectru electronic trebuie definită o traiectorie în mBZ pe liniile de înaltă simetrie pentru a avea o reprezentare grăitoare a benzilor electronice din întreaga mBZ.

Cu această metodologie testăm direct efectele limitei ce trunchiază spațiul impulsului prin definirea unei rețele de mărime variabile, cu variația numărului de mBZ care compun rețeaua. Este de observat că la unghiuri extrem de mici, este nevoie de un număr din ce în ce mai mare de mBZ pentru a descrie fizica funcției de undă la o scară fixă datorită faptului că la unghiuri mici, dimensiunea liniara a unei singure mBZ scade $k_\theta \sim \theta$. Aceasta face ca timpul de calcul pentru obținerea valorilor proprii la unghi mic să crească invers proporțional cu unghiul θ .

Modelare de grafenă rotită dublu strat

Pentru a verifica metoda numerică dezvoltată de noi, o aplicăm la modelarea grafenei. Investigăm mai întâi un model simplificat de grafenă. Modelul chiral în grafenă a fost dezvoltat în aproximația că tunelarea între atomi de carbon de același tip între două straturi de grafenă este neglijată datorită faptului că la unghiuri mici este energetic preferată o structură de tip Bernal în care tunelarea

dominantă este între atomi AB din straturi diferite [15], A și B denotând atomii de carbon din celula unitate. Această aproximație face ca hamiltonianul efectiv să dobândească o simetrie chirală caracterizată de anticomutarea cu matricea Pauli σ_z . Consecința este obținerea unui spectru perfect simetric în energie în jurul nivelului Fermi, lângă punctul K . Spectrul se împăturăște în mini-zona Brillouin, astfel încât se formează multe benzi electronice cu dispersie mică datorită confinării în mBZ. În plus, la anumite „unghiuri magice” de rotație mici, la energie zero, spectrul dezvoltă o bandă plată în întreaga mBZ, despărțită de restul spectrului de o bandă interzisă.

În continuare determinăm spectrul energetic în modelul chiral pentru primele trei unghiuri

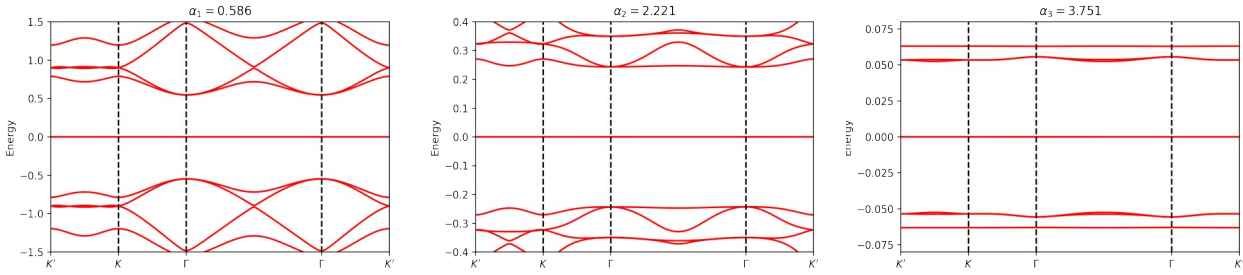


Fig. 6. Spectrul electronic pentru două straturi de grafenă chirală rotite la trei unghiuri magice $\alpha_{1,2,3}$. Regăsim în aceste cazuri benzi plate caracteristice la energie zero identic cu Ref. [15]. Energia este calculată în unități de $v_F k_\theta$ și spectre cu simetrie în jurul nivelului Fermi la $E = 0$.

magice. În acest caz divizăm întregul hamiltonian la energia Fermi și definim o mărime proporțională cu inversul unghiului de rotație $\alpha = \frac{w_1}{2v_F k_{\Gamma K} \sin \theta/2} \simeq \frac{w_1}{v_F k_{\Gamma K} \theta}$, unde w_1 este amplitudinea saltului dintre atomii A și B din straturi diferite, iar v_F este viteza Fermi. Primele trei unghiuri magice sunt $\alpha_1 = 0,586$, $\alpha_2 = 2,221$ și $\alpha_3 = 2,751$. Pentru a obține spectrul trasăm o rețea în spațiul reciproc cu o rețea cu rază aproximativă de $r_k = 5, 8$, respectiv $12 k_\theta$, cu k_θ , transferul de impuls între K și K' adiacente în mini-zona Brillouin moiré. Rețelele corespund la un total de aproximativ 30, 78, respectiv 180 mBZ. Cele trei cazuri prezentate în figura 6 sunt calculate prin diagonalizare exactă cu aproximativ 120, 310 și 650 de benzi împăturite în mBZ de interes. În Fig. 7 observăm în contrast lărgirea benzii plate la un unghi trivial de rotație (diferit de unghiurile magice). Banda de lângă energie zero nu mai este degenerată, exceptând punctele K și K' în mBZ. [Calculul a fost făcut pe 310 benzi în mBZ.]

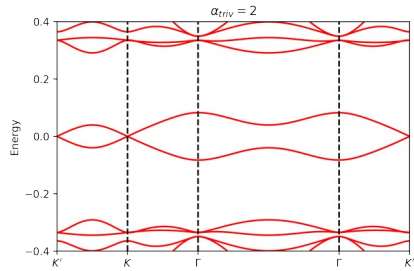


Fig. 7. Lărgirea benzii plate la un unghi de rotație trivial $\alpha = 2$.

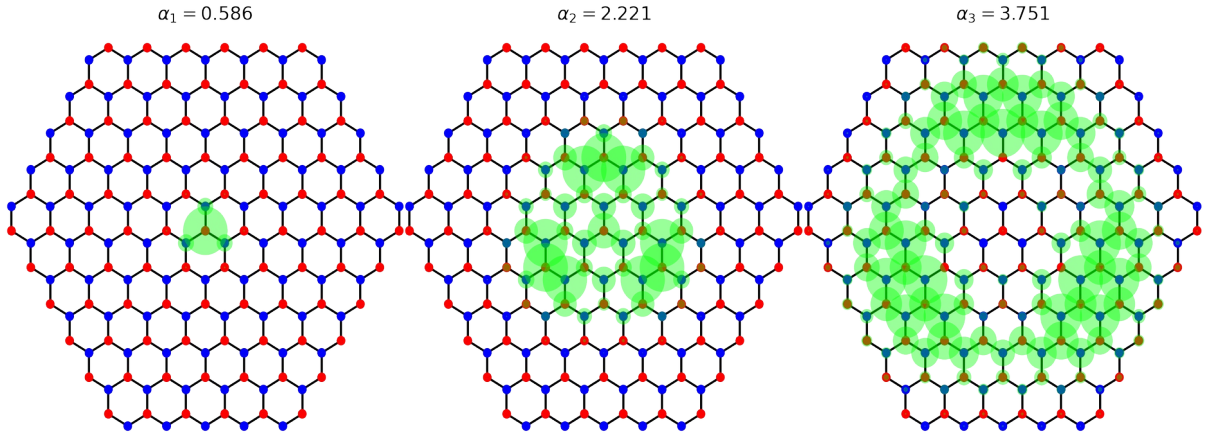


Fig. 8. Distribuția amplitudinilor funcției de undă în spațiul reciproc al impulsului la primele trei unghiuri magice în grafena chirală calculată la un impuls $k = K$ în mBZ. Cu micșorarea unghiului (creșterea α), funcția de undă păstrează simetriile rețelei, dar devine cu suport din ce în ce mai larg, necesitând diagonalizare pe sisteme din ce în ce mai extinse în spațiul impulsului. [Raza discului verde semnifică mărimea relativă a amplitudinii funcției de undă calculate la impulsul denotat de punctul din centrul discului.]

Metoda dezvoltată permite reprezentarea exactă a distribuției funcției de undă în spațiul impulsului. Dovedim astfel prezența unor funcții de undă compacte în spațiul impulsului. Prin faptul acesta arătăm totodată că dimensiunile luate pentru mBZ extinsă sunt suficiente pentru a avea convergență în descrierea spectrului electronic la energie zero (vezi Fig. 8). Funcțiile de undă la unghiuri mari ($\sim 1^\circ$) au suport extrem de compact, ceea ce necesită rețele mici în spațiul k . Acesta indică de exemplu ca o teorie a perturbației la α_1 necesită matrici pentru doar patru puncte K în mBZ [vezi figura 8(stânga)], ceea ce rămâne posibil de calculat analitic. Pentru un hamiltonian calculat în alte puncte decât K , o teorie perturbativă analitică nu mai este fezabilă deoarece implică o distribuție mai extinsă a funcției de undă în multe mBZ. Metoda numerică poate însă trata situații complexe la unghiuri mai mari unde distribuția funcției de undă acoperă zeci de mBZ (vezi figura 8 (dreapta)).

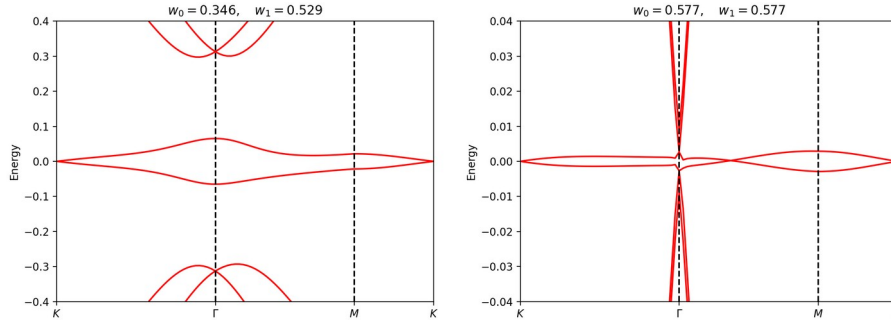


Fig. 9. Straturi de grafenă rotite la $\theta \sim 1^\circ$ pentru două valori de tunelare w_0 cu toate energiile exprimate în unități $v_F k_\theta$. Scara energetică indică benzi de lărgime mică în cazul izotrop. [Calculul este realizat pe 308 benzi în mBZ.]

Utilizând metoda dezvoltată de noi descriem și modelul complet de grafenă din ec. (1), în care există o tunelare finită între atomii AA din straturi diferite, care duce la violarea simetriei chirale. Acest caz este important pentru că generalizează cazul premergător și merge în direcția unei simulări realiste a TMD-urilor. Consideră precum în Ref. [16] două astfel de valori: tunelare izotropică $w_0 = w_1$ sau tunelare $w_1 > w_0$ (figura 9, dreapta și, respectiv, stânga). Tunelarea este adimensională în unități de $v_F k_\theta$ și codează implicit prin k_θ unghiul de rotație a straturilor, care este aici aproximativ de un grad.

Modelare de dicalcogenuri de metale de tranziție

În studiul grafenei am testat în detaliu metoda de producere a structurii electronice la energie joasă în sisteme dublu strat rotite. Acum extindem studiul la TMD-uri de tip dublu strat. Materiale precum MoS₂, MoTe₂, NbSe₂, etc. au multe caracteristici în comun cu grafena. Vom studia în detaliu cazul MoS₂, cea mai abundentă dicalcogenură. Considerăm energia Fermi în banda de conducție aproape de minimumul ei la punctul $K_{U/D}$. La fel ca în grafenă, în sisteme dublu strat avem la energie joasă doar procese de tunelare între punctele $K_{U/D}$ ale straturilor (vezi Fig. 5). Deoarece punctele $K_{U/D}$ și $K'_{U/D}$ sunt decuplate în spațiul momentului, modelul electronic poate fi dezvoltat doar într-un singur punct (o singură vale). Simetria de inversie temporală este conservată și pe baza ei se determină imediat modelul în cealaltă vale, la punctul $K'_{U/D} = -K_{U/D}$.

Există câteva diferențe marcante între TMD și grafenă. Spectrul electronic este parabolic la extremele benzii de conducție și nu linear. Mai important, modelarea trebuie să țină seama de modularea potențialului intra-strat datorită variației formei moiré. Acesta poate fi înțeles ca o variație locală a benzii interzise în MoS₂, MoTe₂ etc [17]. Aceasta variază în forma

$$\Delta(\mathbf{r}) \approx \sum_{j=1,2,3} V \cos(\mathbf{b}_j \cdot \mathbf{d}(\mathbf{r}) + \psi) \equiv \sum_{j=1,2,3} V \cos(\mathbf{G}_j \cdot \mathbf{r} + \psi),$$

unde \mathbf{b}_j sunt trei vectori în rețeaua Bravais a unui strat de grafenă decuplat, cu unghiuri de 120° între ei. Vectorul $\mathbf{d}(\mathbf{r})$ redă variația spațială a distanței dintre doi atomi de metal apropiați, dar plasați în straturi diferite. Datorită rotației cu θ a straturilor, aproximăm $\mathbf{d}(\mathbf{r}) \simeq \theta \mathbf{e}_z \times \mathbf{r}$. Aceasta definește trei vectorii primitivi în zona Brillouin moiré, cf. notației anterioare \mathbf{G}_j (la unghiuri de 120°). Potențialele V și faza totală ψ sunt de obicei extrase din simulări *ab initio* din câteva valori ale distanței \mathbf{d} dintre atomii de Mo.

În metoda numerică dezvoltată reprezentăm modularea potențialului intra-strat prin termeni de salt de ordin superior (vecinii următori) în mBZ extinsă. În figura 10(stânga) este reprezentată o situație tipică pentru un TMD unde există termeni de salt (linii negre) între puncte K diferite (demarcate cu roșu) și separat între puncte K' (cu albastru) în contrast cu grafena (vezi figurile 8 sau 11).

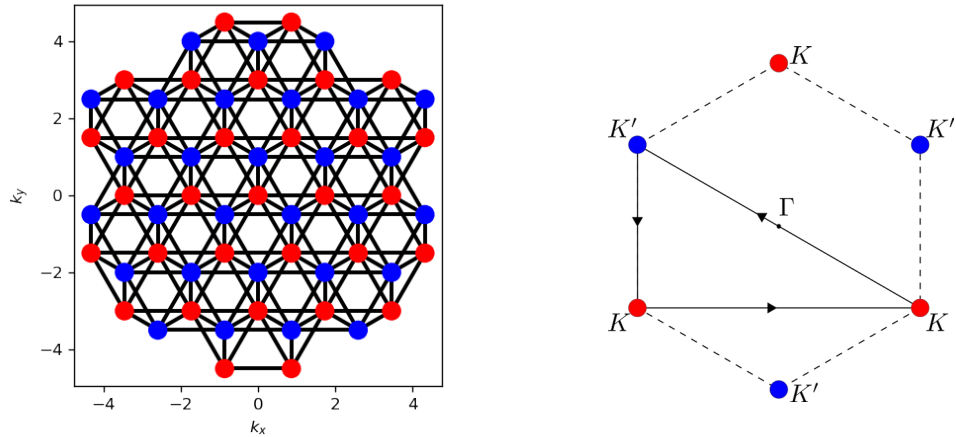


Fig. 10. (Stânga) Rețeaua în spațiul reciproc pe care este reprezentat modelul de straturi MoS₂ rotite. Conține aproximativ 30 de mBZ sau 120 de benzi de energie împăturite în mBZ. (Dreapta) Linii de înaltă simetrie în mini-zona Brillouin de-a lungul cărora calculăm dispersia energetică.

Efecte adiționale sunt datorate faptului că un strat de TMD este compus din două straturi atomice de calcogen și unul de metal. Când două astfel de straturi compuse sunt rotite și așezate unul peste celălalt simetria reflecție pe axa z este violată și termeni de spin-orbită Rashba de semn

opus apar în cele două straturi. Acest cuplaj spin-orbită completează termenii de spin-orbită Ising care sunt datorati violării simetriei de reflecție intra-strat.

Studiu de sistem dublu strat rotit din MoS₂

În continuare vom investiga un model complet de MoS₂ care conține toate aceste efecte. Considerăm MoS₂ dopat în banda de conducție unde fizica este descrisă de un hamiltonian propus recent [18]. Ne restrângem la studiul fizicii într-o singură vale din sistemul decuplat,

$$H = H_L + H_T + H_V,$$

unde H_L reprezintă hamiltonianul din fiecare strat separat, H_V , hamiltonianul pentru modularea de potențial indusă de modelul moiré, iar H_T , hamiltonianul de tunelare între straturile rotite.

$$H_L = \sum_{l=\pm, \mathbf{k}} c_{\mathbf{k}l}^\dagger \left[\frac{\hbar^2(\mathbf{k} - \mathbf{K}_l)}{2m^*} \sigma_0 + \beta_{\text{so}} \sigma_z + (-1)^l \alpha_{\text{so}} ((\mathbf{k} - \mathbf{K}_l) \times \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{e}_z \right] c_{\mathbf{k}l},$$

unde l este un index de strat (+, sus și -, jos), iar sumarea după spin este implicită cu matricile Pauli σ , cu σ_0 matricea identitate. Masa efectivă m^* este jumătate din masa unui electron. \mathbf{K}_l sunt punctele de la marginea mBZ pentru cele două straturi de MoS₂. Cele două efecte spin-orbită sunt reprezentate de cuplajul Ising β_{so} și cuplajul Rashba α_{so} . Operatorii de creație și anihilare pentru electroni în stratul l cu impuls \mathbf{k} sunt $c_{\mathbf{k}l}^\dagger$ și $c_{\mathbf{k}l}$. Matricile Pauli ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$), și matricea identitate σ_0 , reprezintă gradele de libertate de spin.

Termenul de modulare al potențialului în interiorul unui stratului este

$$H_M = \sum_{\mathbf{k}, l=\pm} \sum_{j=1}^6 c_{\mathbf{k}l}^\dagger V [\cos \psi - il(-1)^j \sin \psi] \sigma_0 c_{\mathbf{k}+\mathbf{G}_j l},$$

unde V și ψ sunt extrași din calcule *ab initio*. Termenul cuplează electroni separați de vectorii primitivi în rețeaua reciprocă, care sunt definiți

$$\mathbf{G}_j = -k_\theta \left(\cos \frac{(j-1)\pi}{3}, \sin \frac{(j-1)\pi}{3} \right).$$

Termenul H_M este responsabil de salturile cuantice între vecinii de ordin doi în rețeaua din spațiul reciproc (figura 10, stânga). Termenul de tunelare între straturi este

$$H_T = -w_0 \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},-}^\dagger \sigma_0 (c_{\mathbf{k},+} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{G}_2,+} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{G}_3,+}) + \text{h.c.},$$

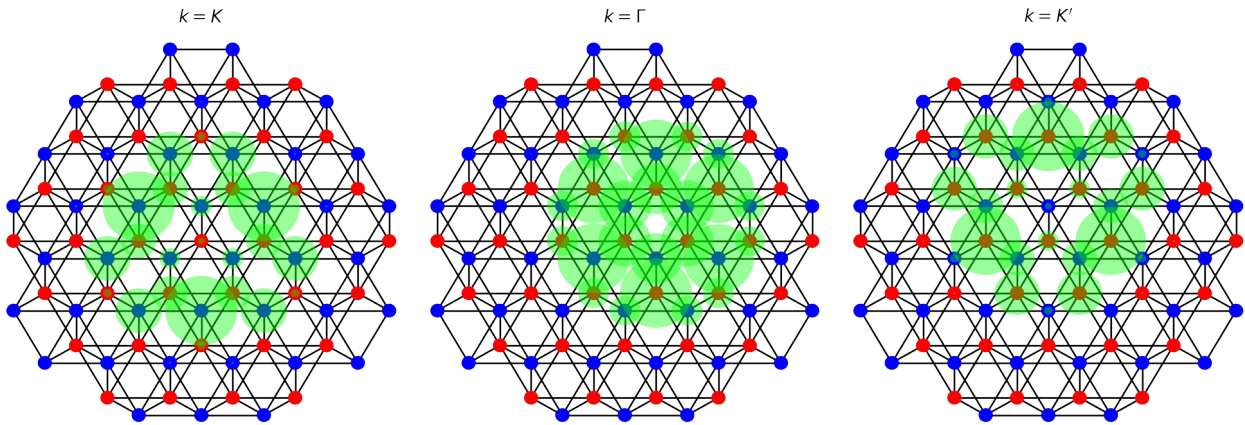


Fig. 11. Evoluția funcției de undă în două straturi de MoS₂ rotite la 1.2°, calculată în trei puncte \mathbf{k} de înaltă simetrie (K , Γ și K'). Funcția de undă este compact reprezentată într-o rețea reciprocă cu aproximativ 40 mBZ. [Raza discului verde semnifică mărimea relativă a amplitudinii funcției de undă calculate la impulsul denotat de punctul din centrul discului.]

unde sunt considerați termeni de salt independenți de spin cu aceeași amplitudine w_0 . Banda electronică la punctul K este separată în spin datorită efectelor de spin-orbită Ising în ambele straturi. Electronii vor tunela astfel separat din banda de spin sus din stratul de sus, la aceeași

energie în banda de spin sus din stratul de jos (și tot la fel pentru electronii din banda de spin jos). Astfel în procesele de tunelare termenii dominanți sunt identici pentru ambii spini, iar în tunelare nu apar termeni de inversare a spinului (cu amplitudine w_1 , cum apar de exemplu în grafena dublu strat). Parametrii modelului sunt prezentați în tabelul 2.

Pentru a reproduce exact fizica în acest punct modelăm o rețea în spațiul impulsurilor care conține aproximativ de 30 de mini-zone Brillouin moiré [vezi figura 10(stânga)]. Deoarece avem două rețele și două proiecții de spin, vorbim în acest caz de aproximative 120 de benzi electronice în mini-zona Brillouin. Aceasta este necesar pentru a reproduce exact fizica la nivelul benzii de conducție. Punctele K în cele două rețele rotite Brillouin sunt descrise fie cu puncte roșii, fie albastre în figura 10. Separat reprezentăm funcția de undă în câteva puncte de înaltă simetrie pentru a ne asigura că rețeaua în spațiul impulsului este suficientă pentru a produce spectre energetice corecte (vezi figura 11).

Observăm totodată o structură tipică pentru funcția de undă în figura 11. În punctele de înaltă simetrie, amplitudinea funcției de undă se distribuie cu simetrie proprie rețelei C_3 sau C_6 . Când determinăm spectrul și funcțiile de undă la un impuls în puncte arbitrare în BZ, funcția de undă rămâne centrată la aceste puncte, dar funcția se distribuie asimetric pe punctele K și K' ale rețelei reciproce. Cum energia variază puțin într-o mBZ, într-o bandă dată, raza medie pentru extensia funcției de undă nu se modifică apreciazabil (vezi figura 11).

La confinarea în mBZ, benzile sistemului devin extrem de înguste. Termenul de spin-orbită Ising induce o separație de spin a benzilor. Astfel se așteaptă să obținem benzi electronice cu un număr Chern ± 1 . Pentru a avea o fizică mai interesantă, cu numere Chern superioare este necesar să se inducă o hibridizare a benzilor de spin diferit prin efecte de tip spin-orbită Rashba. Estimăm acum unghiurile necesare în felul următor. Termenul Ising produce o separare în spin a benzilor de aproximativ 3 meV care trebuie să fie de același ordin cu energia de confinare. Astfel banda de jos de spin majoritar se poate intersecta cu banda de spin minoritar provenită din banda superioară. Cele două scări de energii trebuie să fie de același ordin de mărime,

$$2|\beta_{so}| \sim \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m^* a^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

unde termenul din partea stângă este obținut dintr-o cuantificare de tip puț cuantificat cu pereți înfînți de lărgime comparabilă cu o mBZ, $a/2 \sin(\theta/2)$, cu $a = 3.16 \text{ \AA}$, constanta de rețea. Astfel unghiurile necesare pentru a avea posibile intersecții de benzi sunt determinate: $\theta \sim 1.2^\circ$. În continuare verificăm aceste estimări prin calculul benzilor de energie pentru două straturi de MoS₂ la două unghiuri relative de rotație.

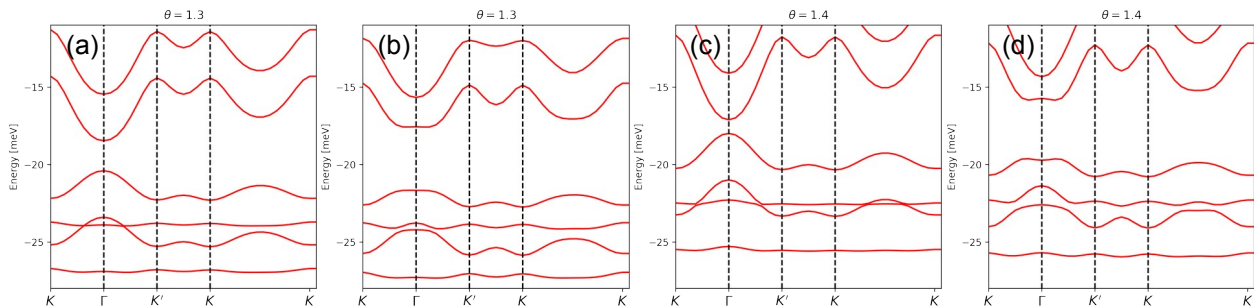


Fig. 12. Spectrul electronic pentru două straturi rotite de MoS₂ pe liniile de înaltă simetrie $K - \Gamma - K' - K$ reprezentate în figura 10(dreapta). Subfigurile (a) și (b) reprezintă o rotație cu un unghi de 1.3° , iar (c) și (d) o rotație cu 1.4° . Subfigurile (a) și (c) reprezintă dispersia fără cuplaj spin-orbită Rashba, iar (b) și (d) incluzându-l.

În figura 12 obținem spectrele energetice pentru două straturi cuplate de MoS₂ și rotite la unghiuri de $\theta = 1.3^\circ$ și 1.4° . Spectrele provin din cuplajul minimului benzii de conducție al celor două strate. A se nota că energia este măsurată de la minimumul benzii de conducție în lipsa efectelor de spin-orbită. Potențialul de modulare intra-strat și termenii de tunelare inter-strat coboară minimumul

de energie până la aproximativ -25 meV. În lipsa efectelor de spin-orbită există un set de benzi inițiale degenerate în spin la distanță de aproximativ 3 meV. În prezența doar a efectelor spin-orbită Ising, se observă în figura 12(a) și (c), separația indusă de $2|\beta_{\text{so}}| = 3$ meV a benzilor inițial degenerate. Datorită competiției cu energia de confinare există intersecții între benzile de spin sus și de jos provenite din benzi diferite. Intersecțiile protejate care există între benzi demonstrează că ele sunt descrise de un număr cuantic de spin conservat și opus. În prezența cuplajului spin-Rashba, există interacțiuni între cele două proiecții de spin și degenerarea la intersecțiile de bandă este ridicată.

Tabel 2. Parametrii pentru modelul efectiv pentru două straturi rotite de MoS_2 .

α_{so}	β_{so}	V	ψ	w_0
$80 \text{ meV} \cdot \text{\AA}$	$-1,5 \text{ meV}$	10 meV	$-89,6^\circ$	10 meV

Parametrii hamiltonianului folosit sunt prezentați în tabelul 2. Calculele necesare pentru a obține figura 12 au fost efectuate pe 120 de benzi împăturite în mBZ. Ele demonstrează posibilitatea de a obține benzi izolate fără spin bine definit datorită interacțiunilor de tip Rashba, și care pot da izolanți topologici cu număr Chern superior. În etapa următoare vom considera efecte suplimentare aduse corelații supraconductoare în aceste benzi interzise deschise de către efectele spin-orbită, pentru a realiza joncțiuni Josephson cu materiale dublu strat rotite relativ.

Studiu de sistem dublu strat rotit din MoTe_2

Metoda cu care am tratat MoS_2 este aplicabilă și la alte TMD-uri. Spre exemplu vom trata în final MoTe_2 . Spre diferență de MoS_2 , aici considerăm banda de valență în care există o separație mare de spin indusă de cuplajul spin-orbită Ising de aproximativ 30 meV [19]. Dacă restrângem analiza la energii apropiate de maximum benzii de valență atunci putem neglija efectele de spin datorate benzii de spin inferioare, iar modelul efectiv poate fi conceput ca fiind perfect polarizat în spin. Astfel gradele de libertate de spin pot fi neglijate. Precum înainte ne concentrăm atenția la o singură vale K din sistemul cu un strat, care este decuplată de valea K' .

Modelul hamiltonian și parametrii lui îi luăm din Ref. [20] unde s-a prezis pentru prima dată că sisteme dublu strat MoTe_2 pot servi pentru realizarea unor izolatori topologici. Aici sistemul minimal este modelat de un hamiltonian cu aceeași structură ca cea din cazul MoS_2 : $H = H_L + H_T + H_M$. Vom considera un model simplificat unde neglijăm modularea termenului de tunelare între straturi în H_T . Datorită faptului că modelul este polarizat în spin, se modifică hamiltonianul pentru straturile separate

$$H_L = \sum_{l=\pm, \mathbf{k}} c_{\mathbf{k}l}^\dagger \left[-\frac{\hbar^2(\mathbf{k} - \mathbf{K}_l)}{2m^*} \right] c_{\mathbf{k}l}.$$

Sistemul este modelat la maximum benzii de valență, unde masa efectivă este negativă $-m^*$, unde $m^* = 0.62m_e$, cu m_e masa electronică. Ceilalți termeni sunt identici cu hamiltonianul MoS_2 , dar eliminând matricile σ_0 de spin. Parametrii modelului sunt prezentați în tabelul 3.

Tabel 3. Parametrii modelului efectiv pentru două straturi rotite de MoTe_2 .

V	ψ	w_0
8 meV	$-89,6^\circ$	-8.5 meV

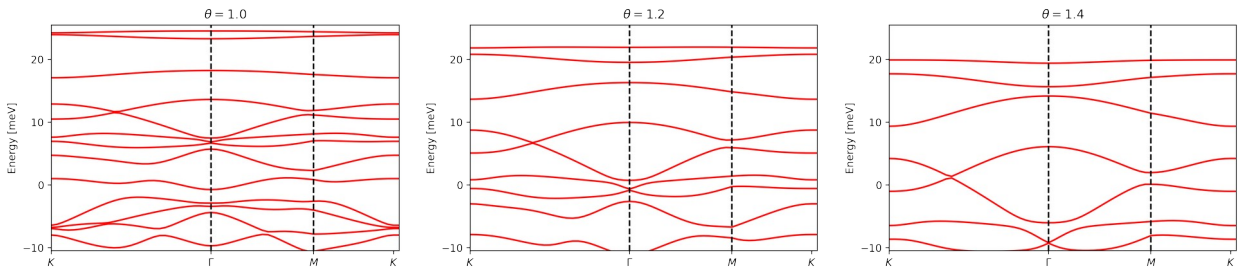


Fig. 13. Spectrul de energie pentru două straturi de MoTe2 rotite la trei unghiuri mici ($\theta \in \{1^\circ, 1.2^\circ, 1.4^\circ\}$). La suprafața Fermi lângă ~ 20 meV se formează două benzi electronice separate în spin și cu topologie netrivială.

Rezultatele pentru spectrul energetic sunt prezentate în figura 13. Ele sunt obținute pe un circuit închis în interiorul unei mBZ centrale, de-a lungul liniilor de înaltă simetrie $K - \Gamma - M - K$. În simulări folosim rețele în spațiul reciproc conținând aproximativ 80 mBZ. Energiile sunt obținute prin diagonalizare exactă pentru modele de 324 benzi energetice pentru fiecare impuls k din rețea. Spectrul energetic arată formarea a două benzi separate de restul lângă energia Fermi, în jur de 20 meV. Aceste benzi rămân separate până la unghiuri de $\theta \sim 3^\circ$.

Prin urmare am demonstrat obținerea de modele electronice pentru grafenă și TMD-uri de tip MoS₂ și MoTe₂, care reproduc spectre electronice *state-of-the-art* pentru astfel de sisteme. Am descris modele efective la suprafața Fermi care dau naștere acestor spectre. Am arătat implementarea numerică a acestor modele în rețele trunchiate în spațiul momentului, precum și comportamentul funcțiilor de undă în aceste rețele. În etapa trei vom considera corelații supraconductoare în sisteme bidimensionale dublu strat rotit pe bază de TMD. În acest caz așteptăm formarea de joncțiuni Josephson unde curentul critic depinde de unghiul de rotație.

Alte activități la Obiectivele 2 și 3

Act. 2.1

Achiziție infrastructura/birotica pentru realizarea proiectului.

Achizițiile principale includ 3 licențe Microsoft Office pentru 3 membrii din proiect, 1 licență Windows 10 Pro, o tabletă E-Ink Onyx Boox Note AIR pentru luat digital notițe, extensie de garanție la 2 laptopuri și diverse alte produse de birotică (hârtie, folii, etc.).

Act. 2.5. Diseminare

Publicații

1. P. Wójcik, D. Sticlet, P. Szumniak, M. P. Nowak, *Helical and topological phase detection based on nonlocal conductance measurements in a three terminal junction*, [Phys. Rev. B 104, 125410 \(2021\)](#).
2. B. Dóra, D. Sticlet, C.P. Moca, *Non-Hermitian Lindhard function and Friedel oscillations* [Phys. Rev. B 104, 125113 \(2021\)](#).
3. D. Sticlet, B. Dóra, C.P. Moca, *Kubo formula for non-Hermitian systems and tachyon optical conductivity*, [arXiv:2104.02428 \(2021\)](#) [acceptat la Phys. Rev. Lett].

4. L. Máthé, D. Sticlet, L.P. Zârbo, *Quantum transport through a quantum dot side-coupled to a Majorana bound state pair in presence of electron-phonon interaction*, [arXiv:2107.05410 \(2021\)](https://arxiv.org/abs/2107.05410) [în evaluare la Phys. Rev. B].

Prezentări orale

1. D. Sticlet, *Linear response theory for non-Hermitian systems*, 13th International Conference on Processes in Isotopes and Molecules (PIM 2021), Cluj-Napoca, România, Septembrie 22-24, 2021.
2. L. Máthé, *Quantum transport through a quantum dot side-coupled to a Majorana bound state pair in presence of electron-phonon interaction*, 13th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-13), Sant Feliu de Guixols, Spania, Septembrie 24-30, 2021.
3. D. Sticlet, *Linear response theory for non-Hermitian systems*, Séminaire Matière Quantique, LPS, Université Paris-Saclay, Orsay, Franța, Septembrie 30, 2021 [[URL](#)].
4. L. Máthé, *Probing Majorana bound states in a quantum dot-topological superconducting nanowire ring system*, 38th Global Nanotechnology Congress, 1-2 Noiembrie 2021 (online).
5. D. Sticlet, *Non-Hermitian linear response theory*, Seminarul departamentului de fizică, Universitatea de Tehnologie și Economie, Budapesta, Ungaria, Noiembrie 19, 2021.
6. L. Máthé, *Detecting of Majorana Bound States in Hybrid Quantum Dot-Topological Superconducting Nanowire Devices*, 2nd Global Webinar on Materials Science and Engineering, Noiembrie 27, 2021 (online).
7. L. Máthé, *Nonequilibrium phonon-assisted current tunneling through a quantum dot-topological superconducting nanowire device*, International Conference on Nanoscience and Nanotechnology (IC2N), Noiembrie 25-26, 2021 (online).

Postere

1. L. Máthé, D. Sticlet, L. Zârbo, *Phonon-assisted transport in a quantum dot coupled to a Majorana bound state*, VCQ Summer School 2021 - Quantum Sensing & Imaging, Viena, Austria, Septembrie 06-10, 2021.
2. L. Máthé, D. Sticlet, L. Zârbo, *Quantum transport through a quantum dot coupled to a Majorana ring*, 13th International Conference on Processes in Isotopes and Molecules (PIM 2021), Cluj-Napoca, România, Septembrie 22-24, 2021.
3. L. Máthé, D. Sticlet, L. Zârbo, *Andreev conductance through a quantum dot-Majorana ring structure*, 4th Autumn School on Physics of Advanced Materials (PAMS-4), Sant Feliu de Guixols, Spania, Septembrie 24-30, 2021. [Poster premiat: *Sponsor's prize offered by American Elements for the best poster presentation delivered by a young scientist.*]
4. L. Máthé, D. Sticlet, L. Zârbo, *Majorana bound state signatures in current through quantum dots in the presence of electron-phonon coupling*, 38th Global Nanotechnology Congress, Noiembrie 01-02, 2021 (online).

Bibliografie

- [1] P. Ordejón, E. Artacho, and J. M. Soler, *Self-Consistent Order-N Density-Functional Calculations for Very Large Systems*, Phys. Rev. B **53**, R10441 (1996).

- [2] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, and D. Sánchez-Portal, *The SIESTA Method for Ab Initio Order-N Materials Simulation*, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 2745 (2002).
- [3] N. Troullier and J. L. Martins, *Structural and Electronic Properties of C₆₀*, Phys. Rev. B **46**, 1754 (1992).
- [4] J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, and K. Burke, *Restoring the Density-Gradient Expansion for Exchange in Solids and Surfaces*, Phys. Rev. Lett. **100**, 136406 (2008).
- [5] J. Tersoff and D. R. Hamann, *Theory of the Scanning Tunneling Microscope*, Phys. Rev. B **31**, 805 (1985).
- [6] G. Gruner, *Density Waves In Solids* (Basic Books, Reading, Mass, 1994).
- [7] D. Sticlet and C. Morari, *Topological Superconductivity from Magnetic Impurities on Monolayer NbSe₂*, Phys. Rev. B **100**, 075420 (2019).
- [8] E. Liebhaber, S. Acero González, R. Baba, G. Reecht, B. W. Heinrich, S. Rohlf, K. Rossnagel, F. von Oppen, and K. J. Franke, *Yu–Shiba–Rusinov States in the Charge-Density Modulated Superconductor NbSe₂*, Nano Lett. **20**, 339 (2020).
- [9] Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, *Unconventional Superconductivity in Magic-Angle Graphene Superlattices*, Nature **556**, 43 (2018).
- [10] R. Bistritzer and A. H. MacDonald, *Moiré Bands in Twisted Double-Layer Graphene*, Proc. Natl. Acad. Sci. **108**, 12233 (2011).
- [11] Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, R. C. Ashoori, and P. Jarillo-Herrero, *Correlated Insulator Behaviour at Half-Filling in Magic-Angle Graphene Superlattices*, Nature **556**, 80 (2018).
- [12] L. Wang, E.-M. Shih, A. Ghiotto, L. Xian, D. A. Rhodes, C. Tan, M. Claassen, D. M. Kennes, Y. Bai, B. Kim, K. Watanabe, T. Taniguchi, X. Zhu, J. Hone, A. Rubio, A. N. Pasupathy, and C. R. Dean, *Correlated Electronic Phases in Twisted Bilayer Transition Metal Dichalcogenides*, Nat. Mater. **19**, 861 (2020).
- [13] Z. Song, Z. Wang, W. Shi, G. Li, C. Fang, and B. A. Bernevig, *All Magic Angles in Twisted Bilayer Graphene Are Topological*, Phys. Rev. Lett. **123**, 036401 (2019).
- [14] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal, *Kwant: A Software Package for Quantum Transport*, New J. Phys. **16**, 063065 (2014).
- [15] G. Tarnopolsky, A. J. Kruchkov, and A. Vishwanath, *Origin of Magic Angles in Twisted Bilayer Graphene*, Phys. Rev. Lett. **122**, 106405 (2019).
- [16] B. A. Bernevig, Z.-D. Song, N. Regnault, and B. Lian, *Twisted Bilayer Graphene. I. Matrix Elements, Approximations, Perturbation Theory, and a k p Two-Band Model*, Phys. Rev. B **103**, 205411 (2021).
- [17] F. Wu, T. Lovorn, and A. H. MacDonald, *Topological Exciton Bands in Moiré Heterojunctions*, Phys. Rev. Lett. **118**, 147401 (2017).
- [18] B. T. Zhou, S. Egan, and M. Franz, *Moiré Flat Chern Bands and Correlated Quantum Anomalous Hall States Generated by Spin-Orbit Couplings in Twisted Homobilayer MoS₂* ArXiv210701328 Cond-Mat (2021).
- [19] G.-B. Liu, W.-Y. Shan, Y. Yao, W. Yao, and D. Xiao, *Three-Band Tight-Binding Model for Monolayers of Group-VIB Transition Metal Dichalcogenides*, Phys. Rev. B **88**, (2013).
- [20] F. Wu, T. Lovorn, E. Tutuc, I. Martin, and A. H. MacDonald, *Topological Insulators in Twisted Transition Metal Dichalcogenide Homobilayers*, Phys. Rev. Lett. **122**, 086402 (2019).

Director de proiect
Doru Sticlet

