

УДК 538.9

## МУАРОВЫЕ ЭКСИТОНЫ В ДВУХ- И ТРЁХСЛОЙНЫХ MoSe<sub>2</sub>-WSe<sub>2</sub>-ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Вовк И.А. (Университет ИТМО), Баймуратов А.С. (Мюнхенский университет имени  
Людвига и Максимилиана, Германия)

Научный руководитель – д.ф.-м.н. Рухленко И.Д.  
(Университет ИТМО)

Представлено экспериментальное и теоретическое исследование экситонов в двумерных гетероструктурах из MoSe<sub>2</sub> и WSe<sub>2</sub> со взаимным поворотом слоёв. Получены оптические спектры двух- и трёхслойных структур MoSe<sub>2</sub>-WSe<sub>2</sub> и предложена их интерпретация в рамках теории модулированных муаровой сверхрешёткой межслойных экситонов.

**Введение.** Формирование муаровой сверхрешётки оказывает существенное влияние на электронную зонную структуру гетероструктур из дихалькогенидов переходных металлов. Несмотря на многочисленные экспериментальные и теоретические исследования, происхождение нижней энергии фотолюминесценции двухслойных MoSe<sub>2</sub>-WSe<sub>2</sub> с муаровой сверхрешёткой всё ещё остаётся предметом дискуссий. В то время как большинство экспериментальных исследований интерпретируют излучение двухслойных MoSe<sub>2</sub>-WSe<sub>2</sub> с помощью прямозонных межслойных экситонов, некоторые исследователи обращаются к экситонам, построенным из гибридизированных состояний зоны проводимости в долине Q. В модулированных муаровой сверхрешёткой двухслойных гетероструктурах электронные состояния демонстрируют контрастные по долинам энергетические сдвиги при межслойной гибридизации, причём состояния в долинах K менее восприимчивы к взаимодействиям, снижающим энергию, чем состояния зоны проводимости в долине Q или состояния валентной зоны в долине Г. Этот эффект часто игнорируется в контексте муаровых экситонов. Для случая трёхслойной MoSe<sub>2</sub>-WSe<sub>2</sub>-гетероструктуры с двумя слоями MoSe<sub>2</sub> можно ожидать ещё более значительных эффектов гибридизации между краевыми состояниями в долине Q.

**Основная часть.** С целью изучить поведение прямозонных и непрямозонных межслойных экситонов мы провели комплексное экспериментально-теоретическое исследование двух- и трёхслойных MoSe<sub>2</sub>-WSe<sub>2</sub>-гетероструктур R-типа со взаимным поворотом слоёв. Для интерпретации оптических спектров фотолюминесценции мы провели DFT-расчеты зонных структур, экситонных состояний и g-факторов. Наши результаты показывают, что фотолюминесценция двухслойных MoSe<sub>2</sub>-WSe<sub>2</sub>-гетероструктур R-типа обусловлена прямозонными межслойными экситонами с муарово-модулированными энергиями излучения. Напротив, в спектрах трёхслойных MoSe<sub>2</sub>-WSe<sub>2</sub>-гетероструктур преобладают непрямозонные межслойные экситоны.

**Выводы.** Результаты нашей работы подчёркивают роль межслойной гибридизации при формировании многослойных ван-дер-ваальсовых гетероструктур.