

1 Theory

In the model introduced by Liu *et al.*, only the orbitals of the M atom are included. We denote the wave functions of the three orbitals of the M atom as

$$|\phi_1\rangle = |d_{z^2}\rangle, \quad |\phi_2\rangle = |d_{xy}\rangle, \quad |\phi_3\rangle = |d_{x^2-y^2}\rangle. \quad (1)$$

The Bloch wavefunction in this model has the form

$$\psi_{\mathbf{k}}^\lambda(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^3 C_j^\lambda(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}). \quad (2)$$

The coefficients $C_j^\lambda(\mathbf{k})$ are the solutions of the eigenvalue equation

$$\sum_{jj'}^3 \left[H_{jj'}^{\text{TB}}(\mathbf{k}) - \varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) S_{jj'}(\mathbf{k}) \right] C_j^\lambda(\mathbf{k}) = 0, \quad (3)$$

where

$$H_{jj'}^{\text{TB}}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \phi_j(\mathbf{r}) | H_{1e} | \phi_{j'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \rangle, \quad (4)$$

and

$$S_{jj'}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} \langle \phi_j(\mathbf{r}) | \phi_{j'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \rangle \approx \delta_{jj'}. \quad (5)$$

In the case $B \neq 0$, wave function can be expressed as the coefficients of C_{ji}^λ in the tight-binding wave function

$$\psi_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_j^3 \sum_i^{2q} C_{ji}^\lambda(\mathbf{k}) \sum_{\alpha}^{N_{\text{UC}}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_\alpha + \mathbf{r}_i)} \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha - \mathbf{r}_i). \quad (6)$$

where $j = 1, 2, 3$ and $i = 1 \dots 2q$. We have shown that, under an uniform magnetic field, Bloch bands λ construct Landau levels at small fields and become fractal-structured at strong fields, which is known as the Hofstadter butterfly.

We now consider a new basis consisting of three eigenfunctions of the angular momentum operators L^2 and L_z , for $l = 2, m = 0, \pm 2$,

$$|\tilde{\phi}_1\rangle = |d_{m=0}\rangle, \quad |\tilde{\phi}_2\rangle = |d_{m=+2}\rangle, \quad |\tilde{\phi}_3\rangle = |d_{m=-2}\rangle. \quad (7)$$

The new basis can be obtained from the old one by the transformation

$$|\tilde{\phi}_j\rangle = \sum_{j'} W_{j'j} |\phi_j\rangle, \quad (8)$$

where

$$W = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

In particular,

$$|\tilde{\phi}_1\rangle = |\phi_1\rangle, \quad (10)$$

$$|\tilde{\phi}_2\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} |\phi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\phi_3\rangle, \quad (11)$$

$$|\tilde{\phi}_3\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} |\phi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\phi_3\rangle. \quad (12)$$

The TB Hamiltonian in new basis reads

$$\tilde{H}^{\text{TB}}(\mathbf{k}) = W^\dagger H^{\text{TB}}(\mathbf{k}) W, \quad (13)$$

where $H^{\text{TB}} = H^{\text{NN}}$ or H^{TNN} .

The cyclotron frequency can be obtained from the energy difference between two Landau levels

$$\hbar\omega_c = E_{n+1} - E_n, \quad (14)$$

which gives

$$\omega_c = \frac{E_{n+1} - E_n}{\hbar}. \quad (15)$$

On the other hand, the cyclotron frequency is also defined as

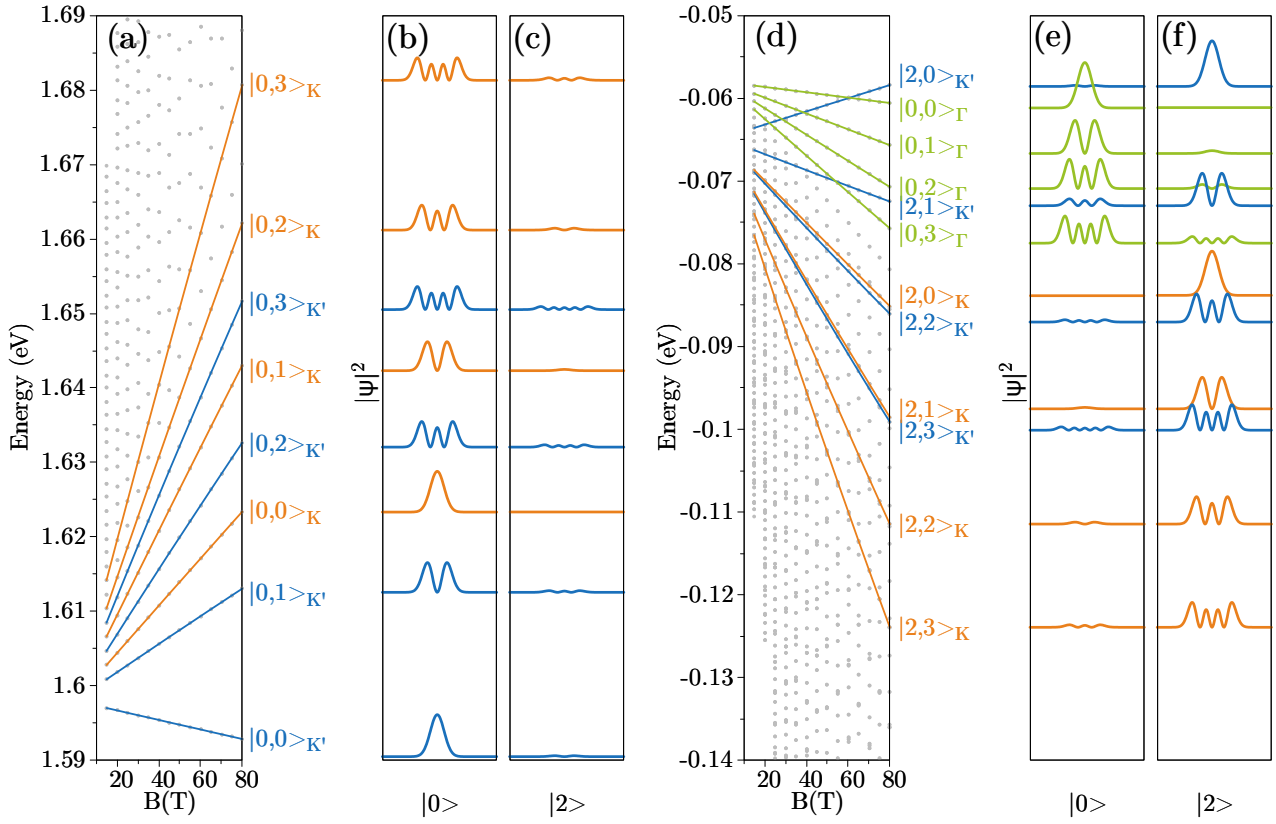
$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}. \quad (16)$$

Combining the two expressions, the effective mas can be written as

$$m^* = \frac{eB}{\omega_c} = \frac{eB}{\frac{E_{n+1}-E_n}{\hbar}} = \frac{eB\hbar}{E_{n+1} - E_n}. \quad (17)$$

1.1 Effective mass

Monolayer MoS₂



Hình 1: Hàm sóng của 2 mức Landau kế tiếp nhau. (a) là dải dẫn, (b) là dải hoá trị.

Cấu trúc dải năng lượng của MoS₂ khi chưa có từ trường cho thấy rằng ở dải hoá trị điểm Γ có mức năng lượng là $E \approx -0.058$ (eV), vậy nên khi ở có sự xuất hiện của từ trường thì mức năng lượng của điểm Γ này vẫn xuất hiện ở đây.

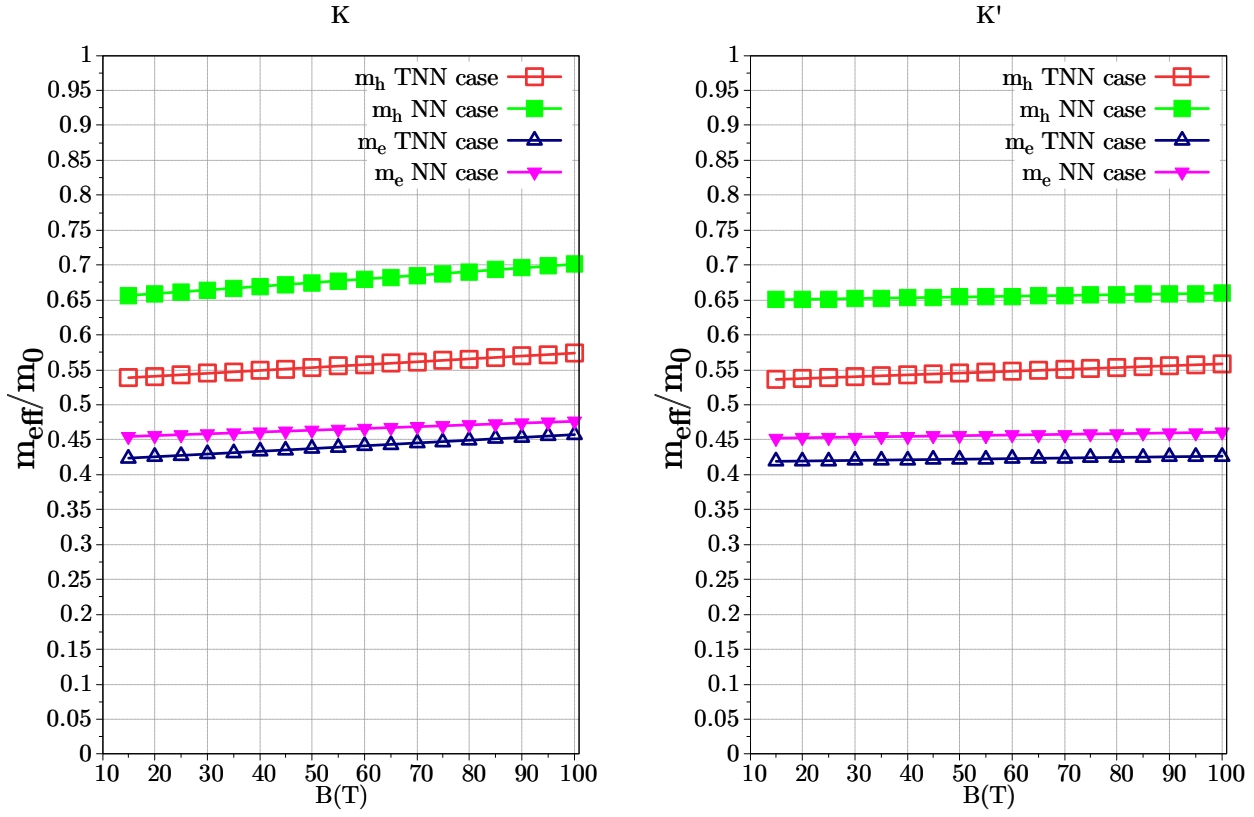
Khối lượng hiệu dụng cho MoS₂ khi chưa có từ trường được tính bằng công thức $\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j}$ cho biết rằng $m_e \approx 0.4178m_0$, $m_h \approx 0.5325m_0$ và $m_r \approx 0.2341$ cho trường hợp TNN và $m_e \approx 0.450m_0$, $m_h \approx 0.6487m_0$ và $m_r \approx 0.2659m_0$ cho trường hợp NN. Trong khi đó, ở bài của Goryca *et al.*[1], họ đưa ra rằng $m_r \approx 0.27 \pm 0.01m_0$. Khi có từ trường lớn ví dụ như $B = 100\text{T}$:

a) Nearest neighbor

- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.7011m_0$, $m_e \approx 0.4763m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.2836m_0$ tăng $\approx 6.7\%$.
- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.6597m_0$, $m_e \approx 0.4606m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.2713m_0$ tăng $\approx 2.0\%$.

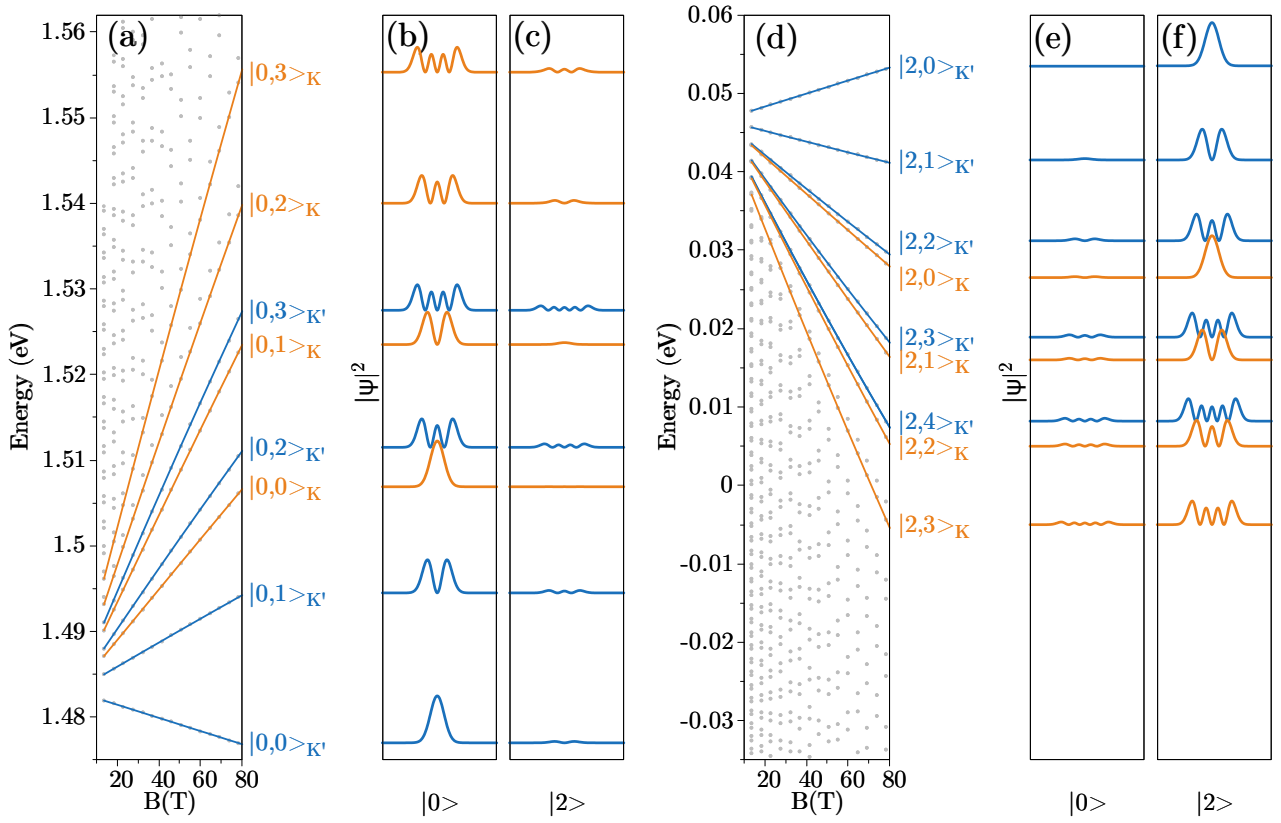
b) Third nearest neighbor

- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.4205m_0$, $m_e \approx 0.3275m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1841m_0$ tăng $\approx 10.17\%$.
- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.4043m_0$, $m_e \approx 0.3023m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1730m_0$ tăng $\approx 3.53\%$.



Hình 2: Khối lượng hiệu dụng.

Monolayer MoSe₂



Hình 3: Hàm sóng của 2 mức Landau kế tiếp nhau.

Cấu trúc dải năng lượng của MoSe₂ khi chưa có từ trường cho thấy rằng điểm Γ không xuất hiện gần điểm K, vậy nên khi có sự xuất hiện của từ trường thì mức năng lượng của điểm Γ này không xuất hiện ở đây. Bên cạnh đó, ba mức Landau đầu tiên sẽ là của điểm K', khác với WSe₂ là hai mức Landau đầu tiên là của điểm K'.

Khối lượng hiệu dụng cho MoSe₂ khi chưa có từ trường được tính bằng công thức $\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j}$ cho biết rằng $m_e \approx 0.4770m_0$, $m_h \approx 0.5887m_0$ và $m_r \approx 0.2634m_0$ cho trường hợp TNN và $m_e \approx 0.5226m_0$, $m_h \approx 0.7512m_0$ và $m_r \approx 0.3082m_0$ cho trường hợp NN.

Khi ở từ trường lớn ví dụ như $B = 100\text{T}$

a) Nearest neighbor

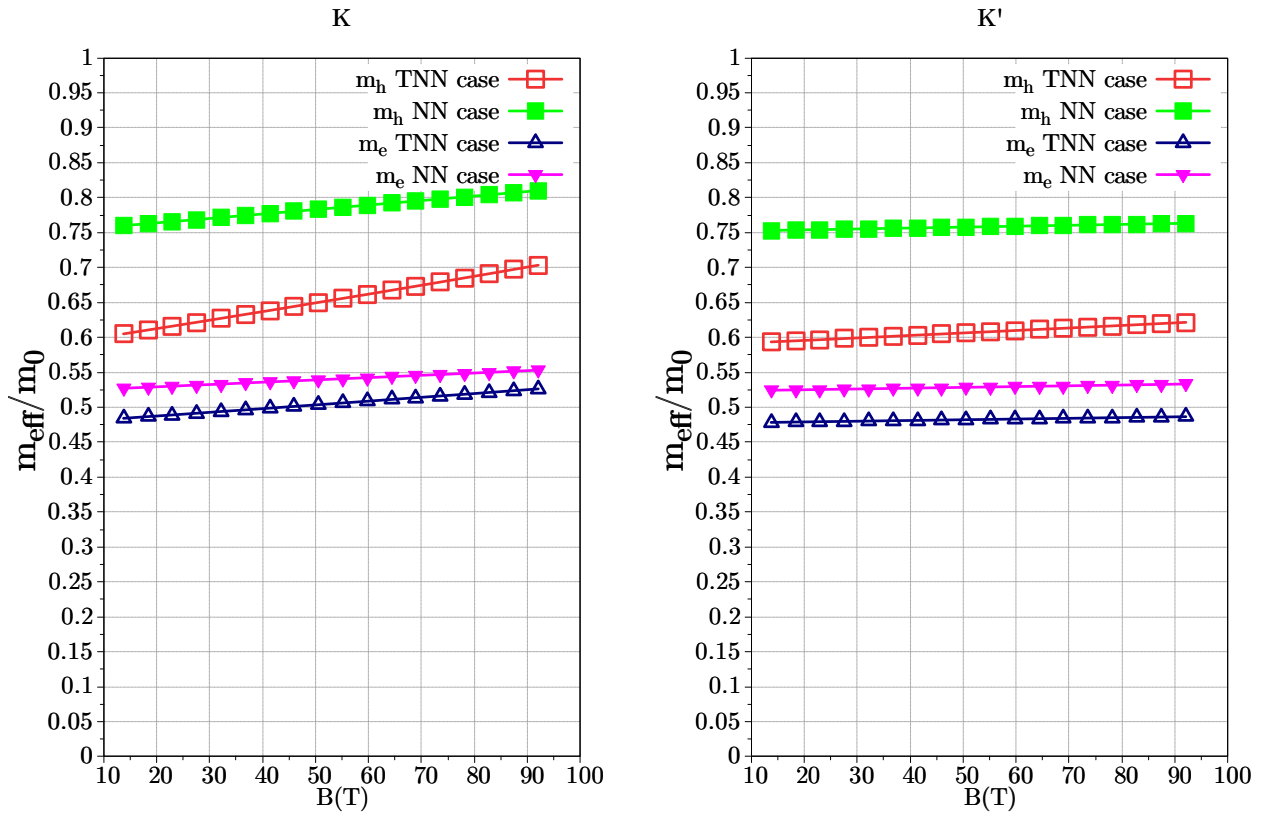
- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.8100m_0$, $m_e \approx 0.5529m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.3286m_0$ tăng $\approx 6.62\%$.
- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.7632m_0$, $m_e \approx 0.5331m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.3138m_0$ tăng $\approx 1.82\%$.

b) Third nearest neighbor

- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.4205m_0$, $m_e \approx 0.3275m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1841m_0$

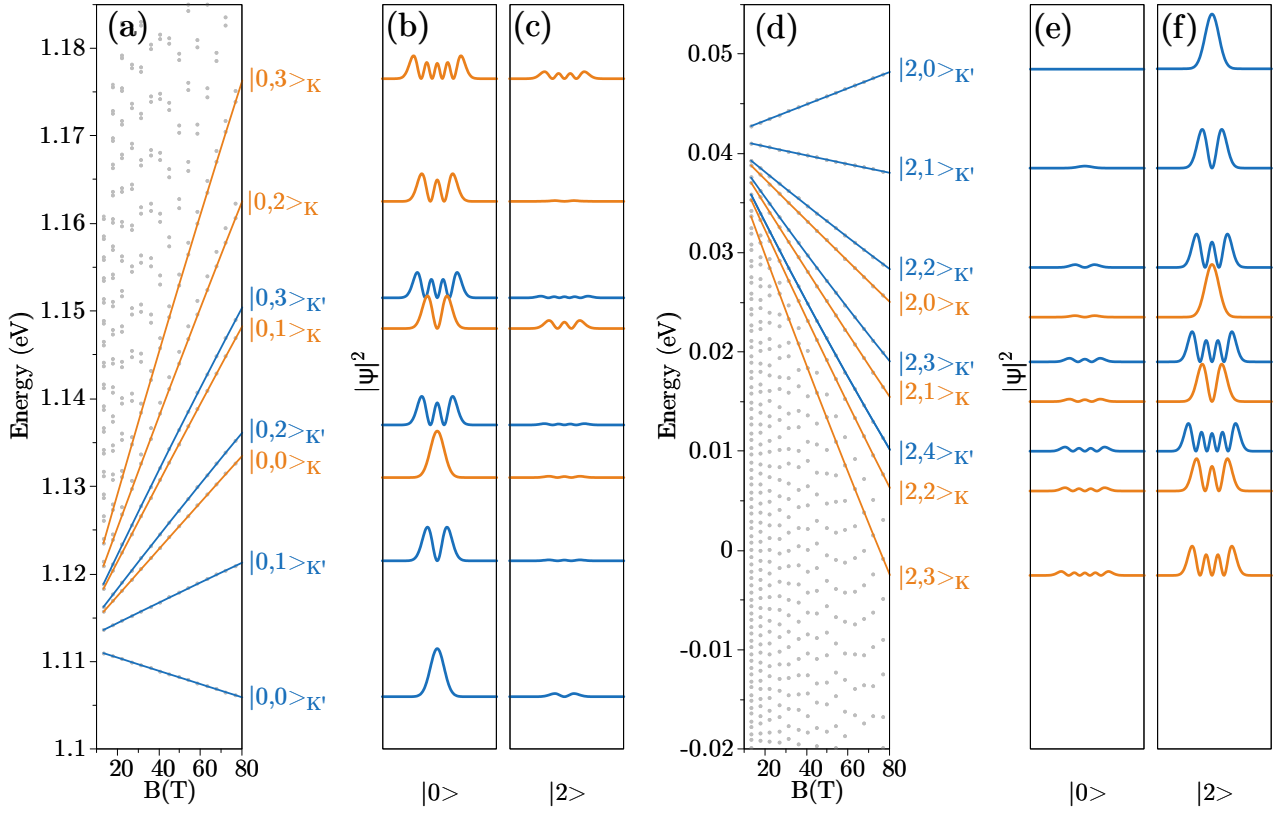
tăng $\approx 10.17\%$.

- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.4043m_0$, $m_e \approx 0.3023m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1730m_0$ tăng $\approx 3.53\%$.



Hình 4: Khối lượng hiệu dụng.

Monolayer MoTe₂



Hình 5: Hàm sóng của 2 mức Landau kế tiếp nhau.

Cấu trúc dải năng lượng của MoTe₂ khi chưa có từ trường cho thấy rằng điểm Γ có mức năng lượng là $E \approx -0.1075$ (eV), vậy nên khi ở có sự xuất hiện của từ trường thì mức năng lượng của điểm Γ này vẫn xuất hiện ở đây.

Khối lượng hiệu dụng cho MoTe₂ khi chưa có từ trường được tính bằng công thức $\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j}$ cho biết rằng $m_e \approx 0.4318m_0$, $m_h \approx 0.6044m_0$ và $m_r \approx 0.2519m_0$ cho trường hợp TNN và $m_e \approx 0.5913m_0$, $m_h \approx 0.8975m_0$ và $m_r \approx 0.3565m_0$ cho trường hợp NN, đã được đưa ra trong công trình của Goryca *et al.*[1]. Khi chưa có từ trường, khối lượng hiệu dụng m_e, m_h của MoTe₂ là lớn nhất trong 6 loại vật liệu.

Khi ở từ trường lớn ví dụ như $B = 90\text{T}$

a) Nearest neighbor

- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.9774m_0$, $m_e \approx 0.6304m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.3832m_0$ tăng $\approx 7.49\%$.
- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.9142m_0$, $m_e \approx 0.6034m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.3635m_0$ tăng $\approx 1.96\%$.

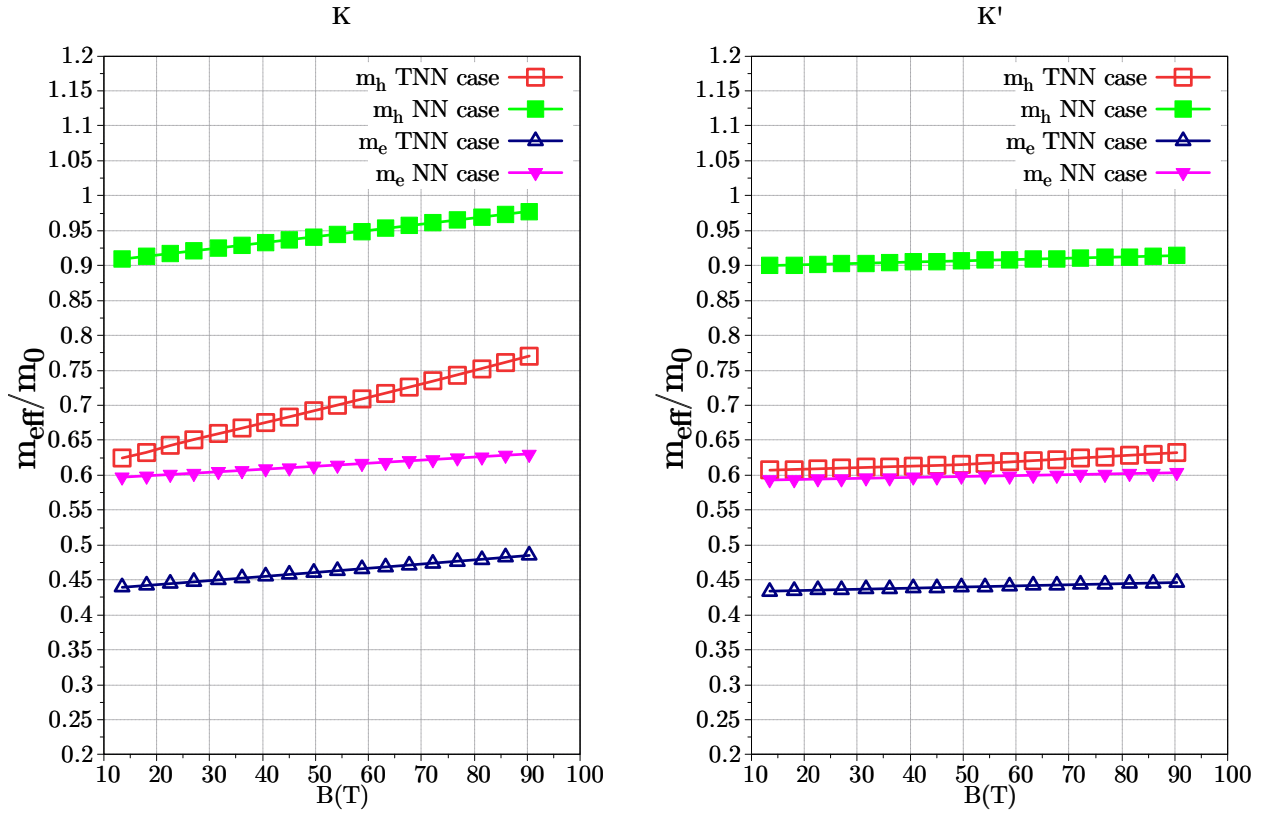
b) Third nearest neighbor

- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.7704m_0$, $m_e \approx 0.4850m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.2976m_0$

tăng $\approx 18.14\%$.

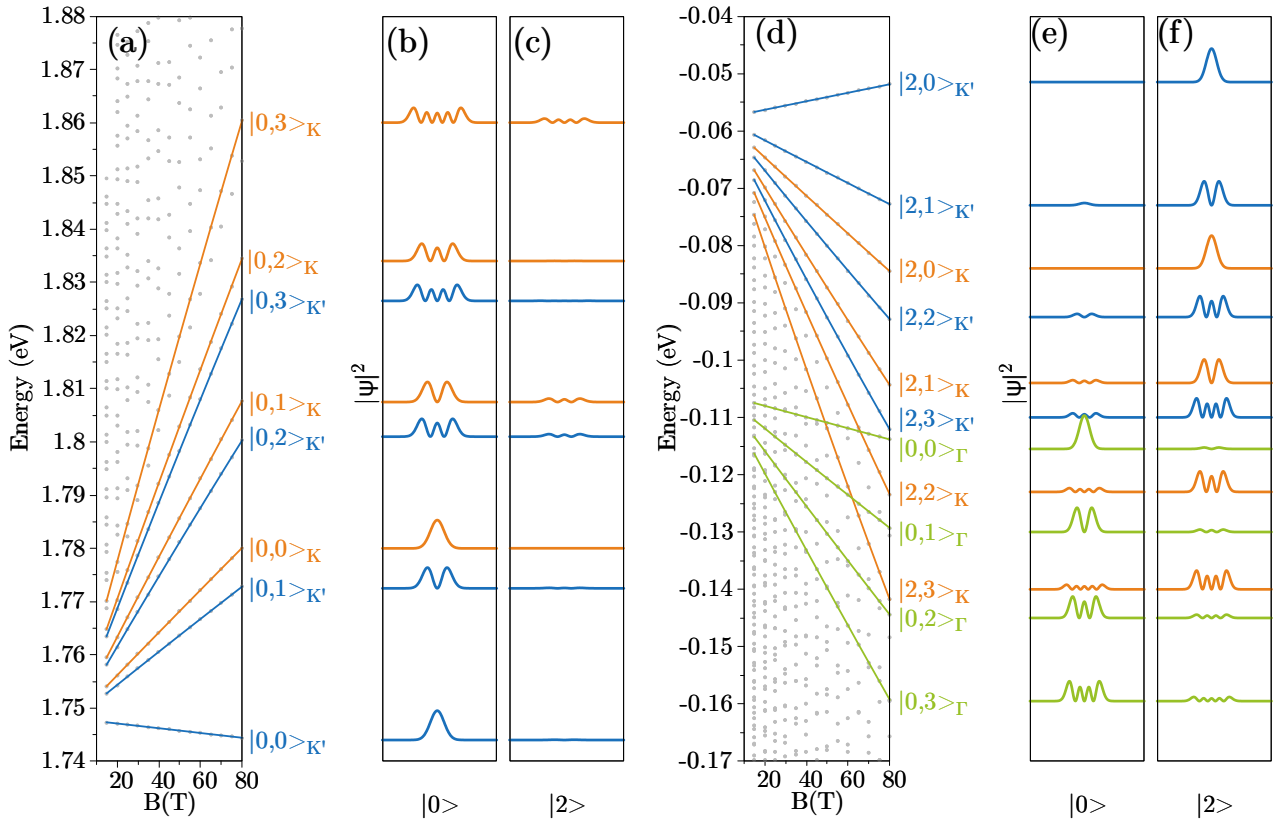
- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.6322m_0$, $m_e \approx 0.4463m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.2616m_0$ tăng $\approx 3.85\%$.

Trong bài nghiên cứu của Goryca *et al.* [1], họ đưa ra rằng $m_r = 0.36 \pm 0.04m_0$, tăng 25% so với bài nghiên cứu của Kormányos *et al.* [2]. Trong bài này, với trường hợp TNN, khối lượng rút gọn $m_r = 0.2976m_0$ tăng $\approx 18\%$ so với khi chưa có từ trường, với $m_r = 0.2519m_0$



Hình 6: Khối lượng hiệu dụng.

Monolayer WS₂



Hình 7: Hàm sóng của 2 mức Landau kế tiếp nhau.

Cấu trúc dải năng lượng của WS₂ khi chưa có từ trường cho thấy rằng điểm Γ có mức năng lượng là $E \approx -0.1075$ (eV), vậy nên khi ở có sự xuất hiện của từ trường thì mức năng lượng của điểm Γ này vẫn xuất hiện ở đây.

Khối lượng hiệu dụng cho WS₂ khi chưa có từ trường được tính bằng công thức $\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j}$ cho biết rằng $m_e \approx 0.2956m_0$, $m_h \approx 0.3845m_0$ và $m_r \approx 0.1671m_0$ cho trường hợp TNN và $m_e \approx 0.3195m_0$, $m_h \approx 0.4348m_0$ và $m_r \approx 0.1841m_0$ cho trường hợp NN, đã được đưa ra trong công trình của Goryca *et al.*[1].

Khi ở từ trường lớn ví dụ như $B = 100\text{T}$

a) Nearest neighbor

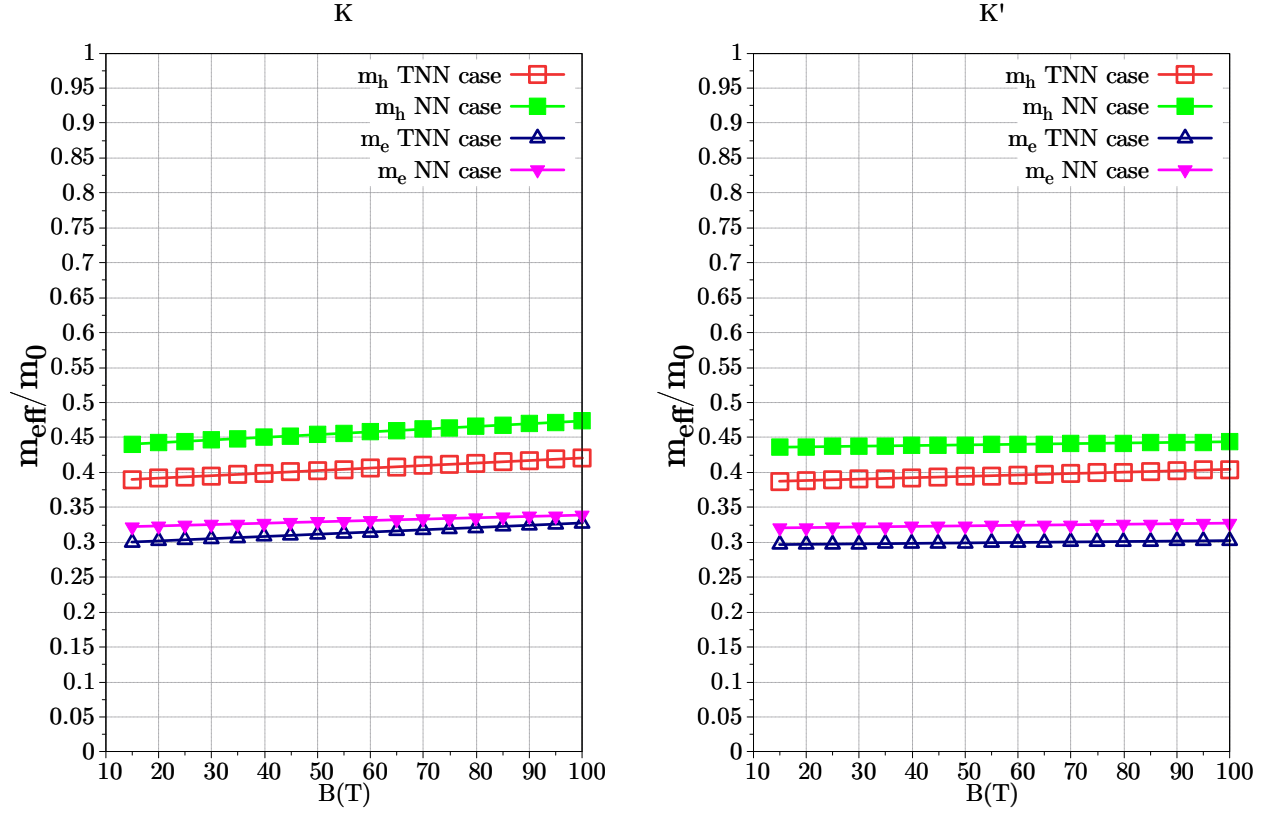
- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.4735m_0$, $m_e \approx 0.3389m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1974m_0$ tăng $\approx 7.2\%$.
- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.4438m_0$, $m_e \approx 0.3273m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1885m_0$ tăng $\approx 2.3\%$.

b) Third nearest neighbor

- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.4205m_0$, $m_e \approx 0.3275m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1841m_0$ tăng $\approx 10.17\%$.

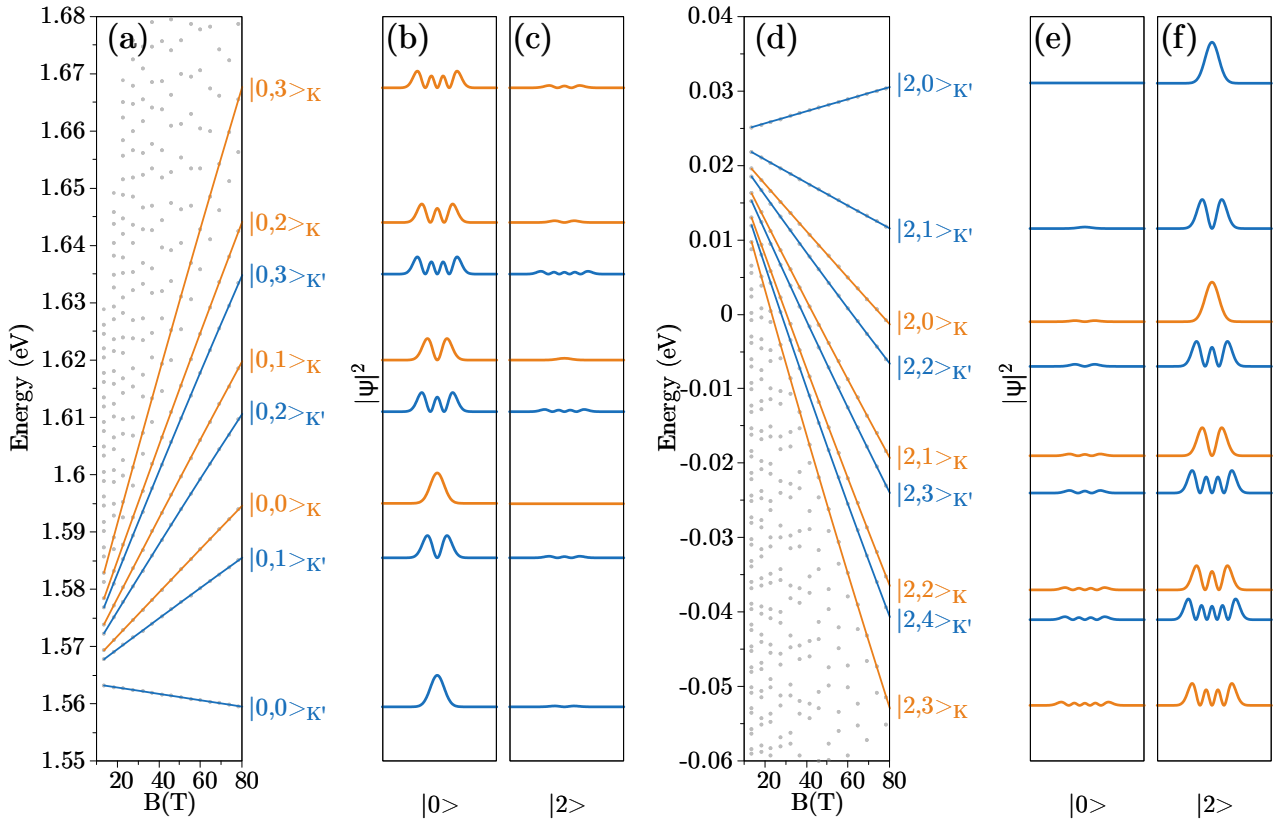
- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.4043m_0$, $m_e \approx 0.3023m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1730m_0$ tăng $\approx 3.53\%$.

Như vậy ở thung lũng K trong trường hợp TNN cho kết quả chính xác khi so sánh m_r khi có từ trường tăng $\approx 10\%$ với m_r khi chưa có từ trường, điều này đã được đưa ra trong bài của Goryca *et al.*[1] trước đó.



Hình 8: Khối lượng hiệu dụng.

Monolayer WSe₂



Hình 9: Hàm sóng của 2 mức Landau kế tiếp nhau.

Cấu trúc dải năng lượng của WSe₂ khi chưa có từ trường cho thấy rằng điểm Γ có mức rất thấp hơn điểm K, vậy nên khi áp dụng từ trường thì mức năng lượng của điểm Γ này không xuất hiện ở đây.

Khối lượng hiệu dụng cho WSe₂ khi chưa có từ trường được tính bằng công thức $\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j}$ cho biết rằng $m_e \approx 0.3124m_0$, $m_h \approx 0.4022m_0$ và $m_r \approx 0.1758m_0$ cho trường hợp TNN và $m_e \approx 0.3487m_0$, $m_h \approx 0.4792m_0$ và $m_r \approx 0.2018m_0$ cho trường hợp NN, đã được đưa ra trong nghiên cứu của Kylänpää *et al.* và Berkelbach *et al.* [3, 4].

Khi ở từ trường lớn ví dụ như $B = 100\text{T}$

a) Nearest neighbor

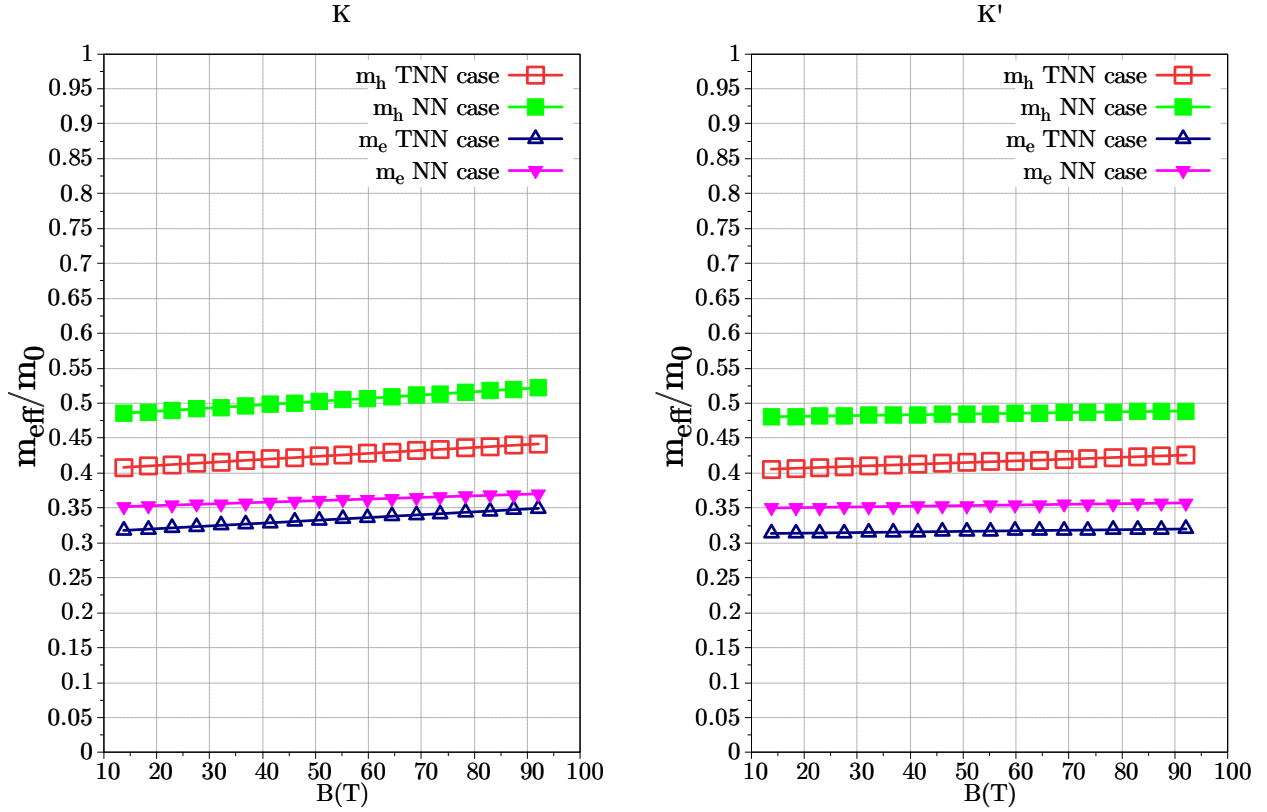
- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.5220m_0$, $m_e \approx 0.3702m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.2166m_0$ tăng $\approx 7.34\%$.
- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.4888m_0$, $m_e \approx 0.3573m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.2064m_0$ tăng $\approx 2.28\%$.

b) Third nearest neighbor

- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.4417m_0$, $m_e \approx 0.3494m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1951m_0$ tăng $\approx 10.98\%$.

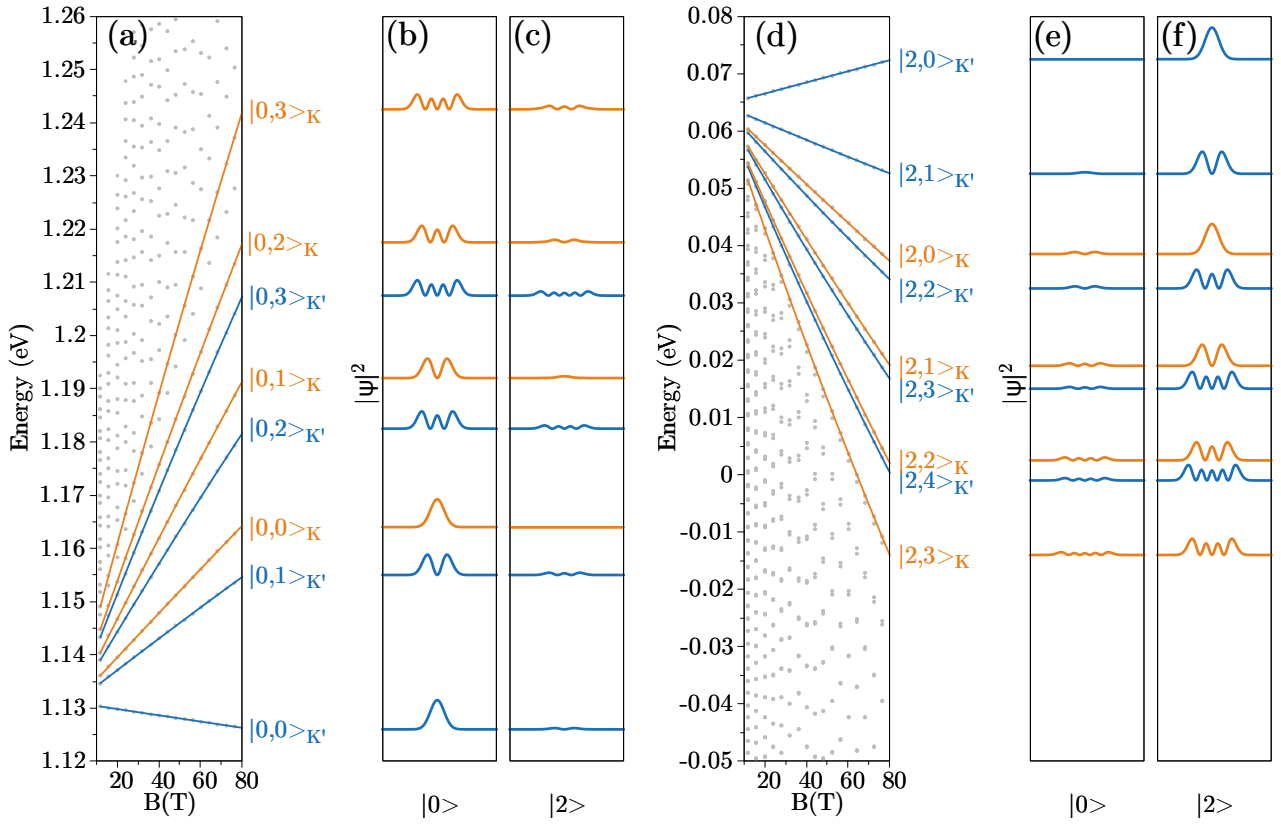
- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.4257m_0$, $m_e \approx 0.3199m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1826m_0$ tăng $\approx 3.87\%$.

Trong bài nghiên cứu của Stier *et al.* [5] đã đưa ra rằng, m_r sẽ lớn hơn sấp sỉ 15% so với dự đoán của những lý thuyết gần đây [3, 4], với $m_r \approx 0.20 \pm 0.01m_0$. Như vậy ở thung lũng K trong trường hợp TNN cho kết quả chính xác khi so sánh m_r khi có từ trường tăng $\approx 11\%$ với m_r khi chưa có từ trường, điều này đã được đưa ra trong bài của Stier *et al.*[5] trước đó.



Hình 10: Khối lượng hiệu dụng.

Monolayer WTe₂



Hình 11: Hàm sóng của 2 mức Landau kế tiếp nhau.

Cấu trúc dải năng lượng của WTe₂ khi chưa có từ trường cho thấy rằng điểm Γ có mức rất thấp hơn điểm K, vậy nên khi áp dụng từ trường thì mức năng lượng của điểm Γ này không xuất hiện ở đây.

Khối lượng hiệu dụng cho WTe₂ khi chưa có từ trường được tính bằng công thức $\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j}$ cho biết rằng $m_e \approx 0.2478m_0$, $m_h \approx 0.3332m_0$ và $m_r \approx 0.1421m_0$ cho trường hợp TNN và $m_e \approx 0.3169m_0$, $m_h \approx 0.4559m_0$ và $m_r \approx 0.187m_0$ cho trường hợp NN. Cho tới nay thì chưa tìm thấy được bài nào có nói về khối lượng hiệu dụng WTe₂. Khi ở từ trường lớn ví dụ như $B = 80\text{T}$

a) Nearest neighbor

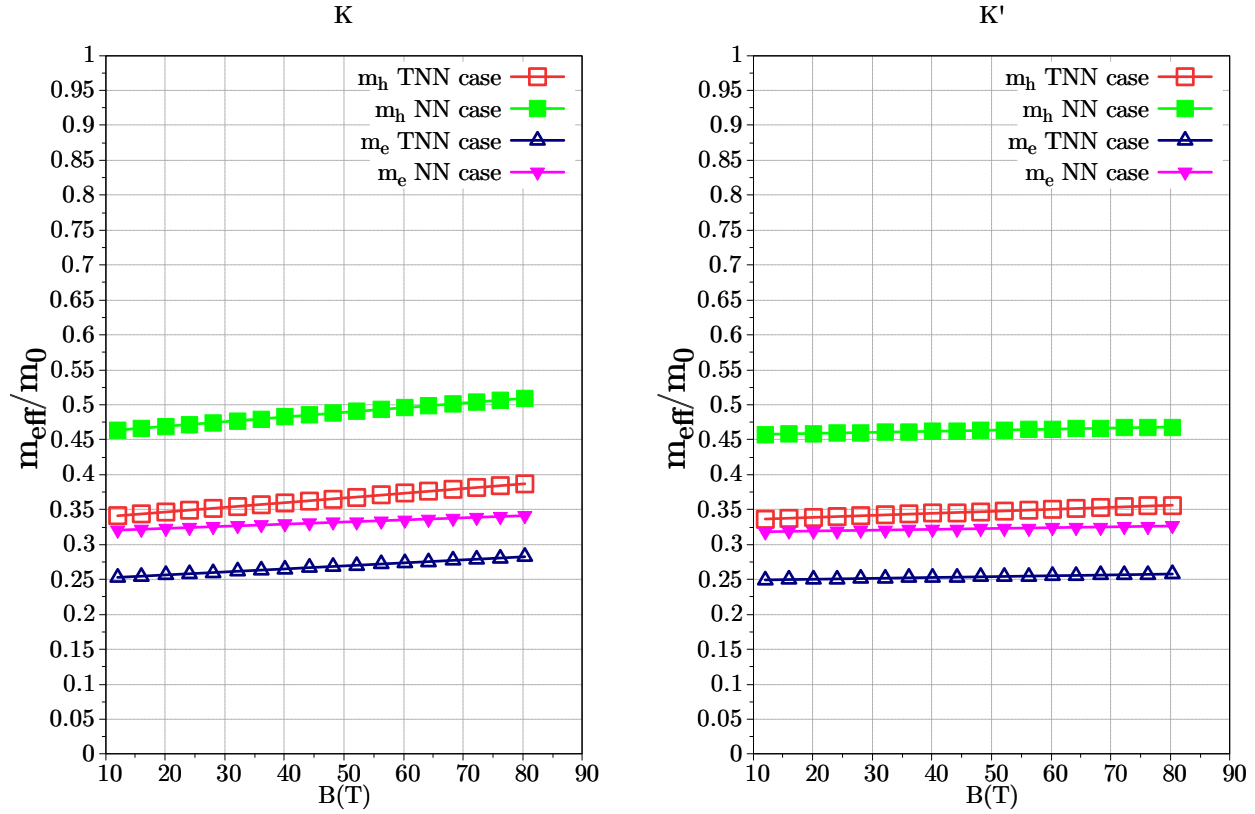
- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.5093m_0$, $m_e \approx 0.3413m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.2044m_0$ tăng $\approx 9.3\%$.
- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.4681m_0$, $m_e \approx 0.3264m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1923m_0$ tăng $\approx 2.83\%$.

b) Third nearest neighbor

- Ở thung lũng K, $m_h \approx 0.387m_0$, $m_e \approx 0.2824m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1633m_0$ tăng $\approx 14.92\%$.

- Ở thung lũng K', $m_h \approx 0.3562m_0$, $m_e \approx 0.2577m_0$. Trong đó $m_r \approx 0.1495m_0$ tăng $\approx 5.21\%$.

Như vậy ở thung lũng K trong trường hợp TNN cho kết quả khối lượng rút gọn m_r của WTe_2 là cho kết quả tăng khoảng 15%, tương tự với các vật liệu trên.



Hình 12: Khối lượng hiệu dụng.

Tài liệu

- [1] Mateusz Goryca, Jing Li, Andreas V Stier, Takashi Taniguchi, Kenji Watanabe, Emmanuel Courtade, Shivangi Shree, Cedric Robert, Bernhard Urbaszek, Xavier Marie, et al. Revealing exciton masses and dielectric properties of monolayer semiconductors with high magnetic fields. *Nature communications*, 10(1):4172, 2019.
- [2] Andor Kormányos, Guido Burkard, Martin Gmitra, Jaroslav Fabian, Viktor Zólyomi, Neil D Drummond, and Vladimir Fal’ko. $k \cdot p$ theory for two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors. *2D Materials*, 2(2):022001, 2015.
- [3] Ilkka Kylänpää and Hannu-Pekka Komsa. Binding energies of exciton complexes in transition metal dichalcogenide monolayers and effect of dielectric environment. *Physical Review B*, 92(20):205418, 2015.
- [4] Timothy C Berkelbach, Mark S Hybertsen, and David R Reichman. Theory of neutral and charged excitons in monolayer transition metal dichalcogenides. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 88(4):045318, 2013.
- [5] Andreas V Stier, Nathan P Wilson, Kirill A Velizhanin, Junichiro Kono, Xiaodong Xu, and Scott A Crooker. Magnetooptics of exciton rydberg states in a monolayer semiconductor. *Physical review letters*, 120(5):057405, 2018.