Электронно-дырочная жидкость в монослойных гетероструктурах на основе дихалькогенидов переходных металлов

 Π . Л. Π ех⁺¹⁾, Π . В. Ратников^{*}, А. П. Силин^{+×}

⁺ Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

*Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

[×] Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 1 октября 2019 г. После переработки 19 ноября 2019 г. Принята к публикации 5 декабря 2019 г.

Монослойные пленки дихалькогенидов переходных металлов (в частности, MoS₂, MoSe₂, WS₂ и WSe₂) могут считаться идеальной системой для исследования высокотемпературной электроннодырочной жидкости. Квазидвумерная природа электронов и дырок обеспечивает более сильное взаимодействие по сравнению с объемными полупроводниками. Экранирование кулоновского взаимодействия в монослойных гетероструктурах существенно ослаблено, поскольку определяется диэлектрическими проницаемостями окружения (например, вакуума и подложки), которые значительно меньше, чем у пленок дихалькогенидах переходных металлов. Многодолинная структура энергетического спектра носителей заряда в дихалькогенидах переходных металлов многократно уменьшает кинетическую энергию, что приводит к увеличению равновесной плотности и энергии связи электронно-дырочной жидкости. В работе найдена энергия связи электронно-дырочной жидкости и ее равновесная плотность. Показано, что в расчетах электронно-дырочной жидкости следует пользоваться двумерным кулоновским потенциалом.

DOI: 10.31857/S0370274X20020058

1. Введение. Повышенный интерес к исследованию графена в качестве перспективного материала для наноэлектроники [1] привел к появлению новых двумерных (2D) материалов, таких как монослои гексагонального нитрида бора, черного фосфора и дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) [2]. В последнее время активно исследуются вертикальные (ван-дер-ваальсовые) гетероструктуры, в которых в заданной последовательности комбинируются различные 2D материалы [3].

Особый интерес представляют мономолекулярные слои ДПМ, описываемых формулой MX_2 , где M – переходный металл, X – халькоген. Наиболее изученными являются полупроводники с атомами металла VI группы (M = Mo, W) и S, Se, Te в качестве халькогена. В объемной форме слоистые ДПМ (например, MoS₂, WS₂, MoSe₂, WSe₂) имеют непрямую энергетическую щель $E_g \sim 1$ эВ [4, 5], в то время как их мономолекулярные слои являются прямозонными полупроводниками с E_g около 2 эВ [6].

Многие объемные образцы ДПМ были получены еще в 1960-х гг. [7]. Их электронные свойства уже тогда интенсивно исследовались [8, 9]. В частности, некоторые ДПМ (M = Nb, Ta, Ti, Mo; X = S, Se) при низких температурах переходят в сверхпроводящее состояние. Структура, синтез, свойства и применение ДПМ детально описаны в недавно опубликованном обзоре [10].

Оптические свойства мономолекулярных слоев ДПМ определяются в значительной степени экситонами и трионами. Энергия связи экситона E_x в ДПМ составляет сотни мэВ (например, в монослоях MoS₂ $E_x = 420$ мэВ [11]), а триона – десятки мэВ [6].

Эти обстоятельства позволяют считать структуры с использованием монослоев ДПМ идеальными системами для исследования высокотемпературной электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ). Энергия одной электрон-дырочной пары в ЭДЖ $|E_{\rm EHL}| \sim E_x$, а критическая температура фазового перехода газ – жидкость $T_c \sim 0.1 |E_{\rm EHL}|$ [12–17], поэтому можно ожидать, что в монослоях ДПМ ЭДЖ будет наблюдаться даже при комнатных температурах. В монослоях MoS₂ уже наблюдалась высокотемпературная сильносвязанная ЭДЖ с $T_c \simeq 500$ K [18].

В настоящей работе мы исследуем возможность образования ЭДЖ в монослоях многодолинных полупроводников [9, 19]. Мы рассмотрим тонкую пленку модельного многодолинного полупроводника на

¹⁾e-mail: pavel.pekh@phystech.edu

диэлектрической подложке в вакууме. Считаем, что полупроводник обладает достаточно широкой энергетической щелью $E_g \gg |E_{\rm EHL}|$ и используем однозонное приближение. Полупроводник имеет большое одинаковое число эквивалентных электронных ν_e и дырочных ν_h долин $\nu_e = \nu_h = \nu \gg 1$ с электронными m_e и дырочными m_h эффективными массами. Многодолинность может обеспечиваться за счет наличия нескольких мономолекулярных слоев в пленке.

Как было показано в работе [20], при $\nu \gg 1$ энергия взаимодействия носителей заряда из разных долин является определяющей в такой системе. Равновесная плотность ЭДЖ $n_{\rm EHL}$ и соответствующая этой плотности энергия $E_{\rm EHL}$ резко возрастают. Такое возрастание плотности оправдывает применение приближения хаотических фаз (ПХФ) для вычисления корреляционной энергии.

2. Модель. Мы исследуем модельную 2D электронно-дырочную систему с гамильтонианом [21, 22]

$$\begin{aligned} \widehat{H} &= \sum_{\mathbf{p}sk}^{\nu_e} \varepsilon_{sk}^e(\mathbf{p}) a_{\mathbf{p}sk}^{\dagger} a_{\mathbf{p}sk} + \sum_{\mathbf{p}sl}^{\nu_h} \varepsilon_{sl}^h(\mathbf{p}) b_{\mathbf{p}sl}^{\dagger} b_{\mathbf{p}sl} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}ss'} V(\mathbf{q}) \left\{ \sum_{kk'}^{\nu_e} a_{\mathbf{p}sk}^{\dagger} a_{\mathbf{p}'s'k'}^{\dagger} a_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}s'k'} a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}sk} + \right. \\ &+ \left. \sum_{ll'}^{\nu_h} b_{\mathbf{p}sl}^{\dagger} b_{\mathbf{p}'s'l'}^{\dagger} b_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}s'l'} b_{\mathbf{p}-\mathbf{q}sl} - \\ &- 2 \sum_{kl}^{\nu_e \nu_h} a_{\mathbf{p}sk}^{\dagger} b_{\mathbf{p}'s'l}^{\dagger} b_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}s'l} a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}sk} \right\}. \end{aligned}$$

Здесь $a_{\mathbf{p}sk}$ $(a_{\mathbf{p}sk}^{\dagger})$ и $b_{\mathbf{p}sl}$ $(b_{\mathbf{p}sl}^{\dagger})$ – фермиевские операторы уничтожения (рождения) электрона и дырки с квазиимпульсом **р** и спином *s* в долинах *k* и *l* соответственно. Законы дисперсии электрона и дырки

$$\varepsilon_{sk}^{e}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^{2}}{2(1+\sigma)m}, \ \varepsilon_{sl}^{h}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^{2}}{2(1+1/\sigma)m}, \quad (2)$$

где $\sigma = m_e/m_h$ и $m = m_e m_h/(m_e + m_h)$ – приведенная масса электрона и дырки. Обычно $\sigma \leq 1$.

Кулоновское взаимодействие в пленках конечной толщины описывается потенциалом Келдыша [23, 24]

$$V(\mathbf{q}) = \frac{2\pi\tilde{e}^2}{|\mathbf{q}|(1+r_0|\mathbf{q}|)},\tag{3}$$

где $\tilde{e}^2 = e^2/\epsilon_{\rm eff}$ и $\epsilon_{\rm eff} = (\epsilon_1 + \epsilon_2)/2$ – эффективная диэлектрическая проницаемость сред, окружающих пленку (например, $\epsilon_1 = 1$ – диэлектрическая проницаемость вакуума, ϵ_2 – диэлектрическая проницаемость подложки), $r_0 = d/2\delta$ – длина экранирования,

6 Письма в ЖЭТФ том 111 вып. 1-2 2020

 $\delta = \epsilon_{\text{eff}}/\epsilon$ (ϵ – диэлектрическая проницаемость материала пленки), d – толщина пленки.

Для монослойной пленки $(d \to 0)$ формула (3) дает стандартное выражение для кулоновского вза-имодействия носителей заряда в 2D системе

$$V(\mathbf{q}) = \frac{2\pi\tilde{e}^2}{|\mathbf{q}|}.$$
(4)

С точки зрения макроскопической электродинамики экранировка кулоновского взаимодействия носителей заряда определяется диэлектрическими проницаемостями сред, окружающих пленку, поскольку силовые линии идут вне пленки. Введение диэлектрической проницаемости ϵ для монослойных пленок ДПМ, как и для графена [1], не имеет физического смысла.

Использование отличного от нуля члена $r_0|\mathbf{q}|$ в знаменателе в скобках формулы (3) продиктовано необходимостью объяснения значительного отклонения энергии нескольких первых экситонных уровней от ридберговской серии [6].

Вначале мы используем потенциал (4) (начало раздела 3, подразделы 3.1 и 3.2). Затем для проверки оправданности использования потенциала (4), а также для сравнения с экспериментом, проводим вычисления с применением потенциала Келдыша (подраздел 3.3). Сравнение результатов расчетов с использованием обоих потенциалов приведено в разделе 5 для монослойной пленки MoS₂.

3. Энергия основного состояния. Энергия основного состояния 2D ЭДЖ, приходящаяся на одну электрон-дырочную пару, записывается как [21, 22]

$$E_{\rm gs} = E_{\rm kin} + E_{\rm exch} + E_{\rm corr}.$$
 (5)

Первое слагаемое – средняя кинетическая энергия (n_{2D} – 2D плотности электронов и дырок)

$$E_{\rm kin} = \frac{\hbar^2 \pi n_{\rm 2D}}{2m\nu} = \frac{1}{r_s^2}.$$
 (6)

Второе слагаемое – обменная энергия

$$E_{\text{exch}} = -\frac{8\sqrt{2}\tilde{e}^2}{3\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{n_{\text{2D}}}{\nu}} = -\frac{8\sqrt{2}}{3\pi r_s}.$$
 (7)

Третье слагаемое – корреляционная энергия (ее определим ниже). Мы ввели безразмерное расстояние между частицами $r_s = \sqrt{\nu/\pi n_{2D}}$. Волновой вектор Ферми равен $q_F = \sqrt{2\pi n_{2D}/\nu} = \sqrt{2}/r_s$. Здесь и далее мы пользуемся системой единиц, в которой энергия связи и радиус 2D экситона положены единице: $E_x = 2m\tilde{e}^4/\hbar^2 = 1$, $a_x = \hbar^2/2m\tilde{e}^2 = 1$.

Главную проблему при вычислении энергии основного состояния ЭДЖ представляет расчет корреляционной энергии. В простейшем случае однодолинного полупроводника $E_{\rm corr}$ была расчитана в работах [21, 22] по методу Нозьера–Пайнса. Показано, что в отличие от трехмерного случая 2D ЭДЖ оказывается более энергетически выгодной, чем газ экситонов уже в изотропном случае, пр'ичем основной вклад в $E_{\rm corr}$ дает вклад передаваемых импульсов, больших импульса Ферми.

Расчеты энергии ЭДЖ были недавно проведены в работе [25]. Корреляционная энергия электронного газа в узкощелевых многодолинных и слоистых полупроводниках была рассчитана в работах [26, 27]. Экситоны Ванье-Мотта в гетероструктурах узкощелевых полупроводников рассмотрены в работе [28].

В работе [29] рассмотрена ЭДЖ в двойных квантовых ямах с пространственно разделенными электронами и дырками в многодолинных полупроводниках. Была рассчитана энергия ЭДЖ и ее равновесная плотность при различных расстояниях между слоями электронов и дырок. Методика расчета корреляционной энергии 2D ЭДЖ при пространственном разделении электронов и дырок изложена в работе [30].

3.1. Вычисление корреляционной энергии при конечном числе долин. Корреляционную энергию представим в виде интеграла по передаваемому импульсу [21, 22, 31, 32]

$$E_{\rm corr} = \int_{0}^{\infty} I(q) dq.$$
 (8)

При малых (по сравнению с q_F) q функция I(q) определяется в рамках ПХФ, а при больших q – суммой диаграмм второго порядка по взаимодействию.

Для произвольного значения σ разложение функции I(q) при малых q получается весьма громоздким. Мы приведем здесь ответ для частного случая равных масс электрона и дырки ($\sigma = 1$)

$$I(q) = \begin{cases} -\frac{2\sqrt{2}}{\pi r_s} q + \frac{2^{1/4}}{r_s^{3/2} \nu^{1/2}} q^{3/2} - \frac{\pi + 2}{2\pi r_s^2 \nu} q^2 + \\ + \frac{3}{2^{13/4} r_s^{5/2} \nu^{3/2}} q^{5/2} + \frac{r_s^2 \nu^2 - 1}{6\pi \sqrt{2} r_s^3 \nu^2} q^3, q \ll 1, \\ -2(4\nu - 1)/q^3, \qquad q \gg 1. \end{cases}$$
(9)

В промежуточной области $q_1 \leq q \leq q_2$ функция I(q) приближается отрезком касательной, как в работах [21, 22]. Интегрируя разложение (9) при $q \ll 1$ от нуля до точки сшивания $q_1 \approx q_0 (q_0 -$ точка минимума функции I(q)), а асимптотику при $q \gg 1$ – от точки сшивания q_2 до бесконечности. До-

бавляя вклад в интеграл от промежуточной области $(I(q_1) + I(q_2)) (q_2 - q_1)/2$, находим

$$E_{\rm corr} = \left(-\frac{\sqrt{2}}{\pi r_s} q_0 + \frac{1}{2^{3/4} r_s^{3/2} \nu^{1/2}} q_0^{3/2} - \frac{\pi + 2}{4\pi r_s^2 \nu} q_0^2 \right) q_2 + \\ + \left(\frac{3}{2^{17/4} r_s^{5/2} \nu^{3/2}} q_2 - \frac{1}{5 \cdot 2^{3/4} r_s^{3/2} \nu^{1/2}} \right) q_0^{5/2} + \\ + \left(\frac{r_s^2 \nu^2 - 1}{12\pi \sqrt{2} r_s^3 \nu^2} q_2 + \frac{\pi + 2}{12\pi r_s^2 \nu} \right) q_0^3 - \frac{r_s^2 \nu^2 - 1}{24\pi \sqrt{2} r_s^3 \nu^2} q_0^4 - \\ - \frac{9}{7 \cdot 2^{17/4} r_s^{5/2} \nu^{3/2}} q_0^{7/2} - \frac{2(4\nu - 1)}{q_2^2} \left(1 - \frac{q_0}{2q_2} \right),$$
(10)

где

$$q_2 = 2\left(\frac{4\nu - 1}{|I(q_0)|}\right)^{1/3}.$$

Точка q_0 при не слишком больших $\nu~(\nu\leq 3)$ и $1\lesssim r_s\lesssim 2$ находится вблизи 1 $(\widetilde{r}_s=\nu r_s)$

$$q_{0} = \frac{9 \cdot 2^{1/4} \tilde{r}_{s}^{2} - 3\pi \tilde{r}_{s}^{3/2} + \frac{15\pi}{2^{7/2}} \tilde{r}_{s}^{1/2} - 2^{1/4}}{2^{5/4} \tilde{r}_{s}^{2} + 3\pi \tilde{r}_{s}^{3/2} - 2^{7/4} (\pi + 2) \tilde{r}_{s} + \frac{45\pi}{2^{7/2}} \tilde{r}_{s}^{1/2} - 2^{5/4}}$$
(11)

Из формулы (10) можно получить оценку снизу для корреляционной энергии при больших ν

$$E_{\rm corr} \gtrsim -4 \left(\frac{6}{\pi}\right)^{1/3} n_{\rm 2D}^{1/3}.$$
 (12)

Мы учли, что при $\nu \gg 1$ положение минимума функции I(q) существенно отклоняется от 1 $(q_0 \rightarrow 2\sqrt{2})$.

Сравнение численных расчетов зависимости корреляционной энергии от числа долин по формуле (10) и с учетом поправок первого и второго порядков по отклонению точки q_1 от точки q_0 приведено на рис. 1 для случая $\sigma = 1$ и $n_{2D} = 1/\pi$ ($r_s = \sqrt{\nu}$). Примечательно, что учет поправок к $E_{\rm corr}$ почти не меняет результат (красные звездочки и черные точки практически совпадают). При больших ν корреляционная энергия стремится к оценке (12). На этом же рисунке приведен результат численного расчета зависимости энергии основного состояния $E_{\rm gs}$ от ν .

3.2. Вычисление корреляционной энергии в пределе большого числа долин. При $\nu \gg 1$, когда n_{2D} удовлетворяют неравенствам [20, 21]

$$1 \ll q_F \ll n_{2D}^{1/4},$$
 (13)

корреляционная энергия дается выражением

$$E_{\rm corr} = -\frac{1}{n_{\rm 2D}} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{0}^{1} \frac{d\lambda}{\lambda} \mathcal{F}(\mathbf{q},\,\omega;\,\lambda), \quad (14)$$

Письма в ЖЭТФ том 111 вып. 1-2 2020



Рис. 1. (Цветной онлайн) Численные расчеты зависимости корреляционной энергии и энергии основного состояния от числа долин: синие квадратики – расчет $E_{\rm corr}$ по формулам (10) – (11); красные звездочки – расчет $E_{\rm corr}$ по формуле (10) с численным решением уравнения на q_0 ; черные точки – расчет $E_{\rm corr}$ с учетом поправок первого и второго порядков по отклонению точки q_1 от точки q_0 (точка q_0 находилась численно); зеленая горизонтальная прямая внизу соответствует оценке (12); фиолетовые треугольники – расчет $E_{\rm gs}$ по формулам (5) – (7) и (10). На вставке показаны q_0 по формуле (11) (синие квадратики) и численно полученные значения q_0 (красные звездочки), причем $q_0 \rightarrow 2\sqrt{2}$ при $\nu \gg 1$

где

$$\mathcal{F}(\mathbf{q},\,\omega;\,\lambda) = \frac{\lambda V(\mathbf{q})\Pi_0(\mathbf{q},\,i\omega)}{1 - \lambda V(\mathbf{q})\Pi_0(\mathbf{q},\,i\omega)} - \lambda V(\mathbf{q})\Pi_0(\mathbf{q},\,i\omega),$$

 $\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega)$ — поляризационный оператор в нулевом приближении по взаимодействию при больших передаваемых импульсах $(q \gg q_F)$ и частотах $(\omega \gg E_F)$

$$\Pi_0(\mathbf{q}, i\omega) = -2n_{2\mathrm{D}} \sum_{j=e,h} \frac{\varepsilon_j(\mathbf{q})}{\varepsilon_j^2(\mathbf{q}) + \omega^2}.$$
 (15)

Законы дисперсии $\varepsilon_j(\mathbf{q})$ те же, что и в формулах (2).

Выражение (14) легко обезразмеривается заменой переменных $q = (4\pi n_{2D}\lambda)^{1/3} \xi$, $\omega = (4\pi n_{2D}\lambda)^{2/3} \zeta$. Корреляционная энергия для произвольного отношения масс электрона и дырки σ выражается как

$$E_{\rm corr} = -A(\sigma) n_{\rm 2D}^{1/3},$$
 (16)

где введена функция

$$A(\sigma) = \frac{3}{(4\pi)^{2/3}} \int_{0}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\xi^3 \left(\frac{\eta_e}{\xi^4 + \eta_e^2 \zeta^2} + \frac{\eta_h}{\xi^4 + \eta_h^2 \zeta^2}\right)^2}{1 + \xi \left[\frac{\eta_e}{\xi^4 + \eta_e^2 \zeta^2} + \frac{\eta_h}{\xi^4 + \eta_h^2 \zeta^2}\right]}.$$

Численный расчет функци
и $A(\sigma)$ представлен на рис. 2. Ее удобно аппроксимировать выражением

Письма в ЖЭТФ том 111 вып. 1-2 2020



Рис. 2. (Цветной онлайн) Численный расчет $A(\sigma)$

$$A(\sigma) \approx \frac{0.23}{\sigma^{2/3}} e^{-4\sigma} - 0.098\sigma^3 + 0.378\sigma^2 - 0.442\sigma + 4.932.$$

Для $\sigma = 1$ имеем

$$A(1) = \frac{3 \cdot 2^{1/3}}{\pi^{1/6}} \Gamma\left(\frac{2}{3}\right) \Gamma\left(\frac{5}{6}\right) \approx 4.774$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция Эйлера.

Это значение близко к коэффициенту в оценке (12): $4\sqrt[3]{6/\pi} \approx 4.963$. Отметим, что и в пределе $\nu \to \infty$ оценка (12) остается оценкой снизу для $E_{\rm corr}$. Уменьшение константы A(1) по сравнению с коэффициентом в оценке (12) связано с тем, что не полностью учтен вклад малых импульсов и частот при использовании асимптотического выражения (15).

3.3. Вычисление энергии основного состояния с использованием потенциала Келдыша. Средняя кинетическая энергия (6) остается той же. Обменная энергия выразится как ($\rho_0 = r_0 q_F$)

$$E_{\text{exch}}^{K} = -\frac{\sqrt{2}}{\pi r_s} \left[\frac{8}{3} - J(\rho_0) \right], \qquad (17)$$

где введена функция

$$J(\rho_0) = \int_0^1 x dx \int_0^1 y dy \int_0^{2\pi} \frac{\rho_0 d\varphi}{1 + \rho_0 \sqrt{x^2 + y^2 - 2xy \cos\varphi}}$$

При характерных плотностях $n_{2D} \sim 10^{13} - 10^{14} \text{ см}^{-2}$ безразмерная величина $\rho_0 \simeq 2 - 9$ для $\nu = 2$. Поэтому представляет интерес численный расчет функции $J(\rho_0)$ в интервале $0 < \rho_0 < 10$. В пределе больших ρ_0 она стремится к $\frac{8}{3}$ (см. рис. 3).

Корреляционную энергию найдем по методу, изложенному в подразделе 3.1. Теперь вместо функции I(q) в интеграле (8) стоит функция

$$\widetilde{I}(q) = \begin{cases} -\frac{2\sqrt{2}}{\pi r_s(1+\rho_0 q)}q + \frac{2^{1/4}}{r_s^{3/2}\nu^{1/2}\sqrt{1+\rho_0 q}}q^{3/2} - \\ -\frac{\pi+2}{2\pi r_s^2\nu}q^2 + \frac{3\sqrt{1+\rho_0 q}}{2^{13/4}r_s^{5/2}\nu^{3/2}}q^{5/2} + \\ +\frac{r_s^2\nu^2 - 1}{6\pi\sqrt{2}r_s^3\nu^2(1+\rho_0 q)}q^3, \quad q \ll 1, \\ -\frac{2(4\nu-1)}{q^3(1+\rho_0 q)^2}, \quad q \gg 1. \end{cases}$$
(18)



Рис. 3. (Цветной онлайн) Численный расчет $J(\rho_0)$

В промежуточной области волновых векторов q функция $\tilde{I}(q)$ также приближается отрезком прямой. Интегрируя $\tilde{I}(q)$ по q, получаем выражение для корреляционной энергии $E_{\text{согг}}^{K}$. Оно весьма длинное и ради краткости мы его не приводим. Однако отметим, что при больших ν , когда можно считать $\rho_0 q_1 \ll 1$ и $\rho_0 q_2 \ll 1$ (q_1 и q_2 – точки сшивания, причем $q_1 \approx q_0$, q_0 – точка минимума функции $\tilde{I}(q)$), это выражение может быть разложено по степеням ρ_0 как

$$E_{\rm corr}^K = E_{\rm corr} + \delta E_{\rm corr}^K, \tag{19}$$

где $E_{\rm corr}$ дается выражением (10), а поправка $\delta E_{\rm corr}^K$ в линейном приближении по ρ_0 равна

$$\begin{split} \delta E_{\rm corr}^K &= \rho_0 \left[-\frac{\sqrt{2}}{3\pi r_s} q_0^3 + \frac{3}{7 \cdot 2^{7/4} r_s^{3/2} \nu^{1/2}} q_0^{7/2} + \right. \\ &\left. + \frac{2(4\nu - 1)}{q_2} \left(3 - \frac{q_0}{q_2} \right) + \left(\frac{\sqrt{2}}{\pi r_s} - \frac{\sqrt{q_0}}{2^{7/4} r_s^{3/2} \nu^{1/2}} \right) q_0^2 q_2 \right]. \end{split}$$

4. Равновесные плотность и энергия ЭДЖ. Равновесная плотность ЭДЖ $n_{\rm EHL}$ находится как положение минимума энергии основного состояния. Подставляя в (5) корреляционную энергию для системы с многими долинами (16) и дифференцируя по $n_{\rm 2D}$, получаем уравнение на $n_{\rm EHL}$

$$\frac{\partial E_{\rm gs}}{\partial n_{\rm 2D}}\Big|_{n_{\rm EHL}} = \frac{\pi}{\nu} - \frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{\pi\nu}} n_{\rm EHL}^{-1/2} - \frac{1}{3} A(\sigma) n_{\rm EHL}^{-2/3} = 0.$$
(20)

Чтобы решить уравнение (20), заметим, что для $\nu \gg 1$ обменная энергия (7) по модулю существенно меньше, чем кинетическая и корреляционная (по модулю) энергии. Поэтому сначала можно пренебречь вторым слагаемым в (20), а затем найти поправку к равновесной плотности на обменную энергию:

$$n_{\rm EHL} = \left(1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{3}\right)^{3/4} \nu^{1/4} A^{3/4}}\right) \left(\frac{\nu A}{3\pi}\right)^{3/2},\tag{21}$$

$$E_{\rm EHL} = -\frac{2}{3} \left(\frac{\nu}{3\pi}\right)^{1/2} A^{3/2} - \frac{2^{7/2} \nu^{1/4}}{3^{7/4} \pi^{5/4}} A^{3/4}.$$
 (22)

Перспективными на наш взгляд являются многослойные многодолинные системы (число слоев l, расстояние между слоями c). Если $d = lc \leq a_x$, то можно пренебречь вторым слагаемым в знаменателе (3). В этом случае можно использовать формулу (4). Эффективная многодолинность $\nu_{\text{eff}} = l\nu$ существенно возрастает.

Сравнение расчетов равновесных плотности и энергии ЭДЖ в зависимости от отношения масс электрона и дырки с использованием формулы для корреляционной энергии (10) или (16) для системы с 10 разделенными монослоями ДПМ ($\nu_{\rm eff} = 20$) приведено на рис. 4.



Рис. 4. (Цветной онлайн) Результаты расчетов *n*_{EHL} (выделено красным цветом) и *E*_{EHL} (выделено синим цветом) в 10-слойной системе с использованием формулы (10) (непрерывные линии) или (16) (пунктирные линии – с аналитическими зависимостями (21) и (22), штрих-пунктирные линии – с численным решением уравнения (20))

5. Сравнение результатов расчетов с экспериментом. Сравним результаты вычислений по формулам (5)–(7) и (10) с экспериментальными значениями $n_{\rm EHL}$, $|E_{\rm EHL}|$ и T_c для монослойной пленки ${\rm MoS}_2$ [18]. С хорошей точностью можно положить $m_e \approx m_h$ [33]. Если $\nu = 2$, то $|E_{\rm EHL}| = 700$ мэВ, $n_{\rm EHL} = 10^{14}$ см⁻² и $T_c \simeq 800$ К. Экспериментальные значения: $|E_{\rm EHL}| = 480$ мэВ, $n_{\rm EHL} = 4 \cdot 10^{13}$ см⁻² и $T_c \simeq 500$ К [18]. Мы считаем, что возможны два объяснения этого расхождения.

Первое объяснение: число долин уменьшается. Возникающие в монослойной пленке напряжения могут привести к снятию вырождения долин [16, 17]. Кроме того, снятие спинового вырождения носителей заряда также равносильно уменьшению числа долин вдвое. Это возможно вследствие большого спин-орбитального расщепления валентной зоны $\Delta_{vb} \approx 148$ мэВ [25]. Для $\nu = 1$ мы получаем хорошее согласие с экспериментом: $|E_{\rm EHL}| = 450$ мэВ, $n_{\rm EHL} =$ $= 3.3 \cdot 10^{13}$ см⁻² и $T_c = 520$ K.

Второе объяснение: необходимо использовать потенциал Келдыша, который содержит подгоночный параметр r_0 . При $r_0 = 0.7$ Å и $\nu = 2$ обеспечивается наилучшее согласие расчетного значения энергии ЭДЖ $|E_{\rm EHL}| = 480$ мэВ с экспериментальным значением, однако при этом мы получаем завышенное значение $n_{\rm EHL} = 5.4 \cdot 10^{13}$ см⁻².

При количественном описании положения экситонных линий в спектре фотолюминесценции монослоя $MoS_2 r_0 = 41.47$ Å [34]. Большое отличие в r_0 определяется тем, что при расчете экситона и ЭДЖ учитываются существенно различные диаграммы – лестничные и петлевые, соответственно.

Мы склоняемся в пользу первого объяснения.

6. Заключение. В данной работе получены аналитические и численные результаты для энергии связи ЭДЖ и ее равновесной плотности в 2D системах с монослоями ДПМ при произвольном числе долин.

Нами также проведен расчет характеристик ЭДЖ с использованием потенциала Келдыша. Оказалось, что использование только одного параметра r_0 не позволяет одновременно согласовать энергию связи ЭДЖ и ее равновесную плотность с экспериментальными результатами. Это обстоятельство указывает на сильную ограниченность применимости потенциала Келдыша в этих расчетах.

Отличие теоретических результатов от экспериментальных связано с недостаточной точностью используемых параметров монослойных гетероструктур и использованием в качестве единиц экспериментальных значений E_x и a_x , а также возможной неоднородностью образца.

П.В. Ратников благодарит за финансовую поддержку Фонд развития теоретической физики и математики "БАЗИС", грант #17-14-440-1 (в части общей формулировки задачи) и Российский научный фонд, грант #16-12-10538-П (в части вычисления корреляционной энергии, раздел 3).

- 1. П.В. Ратников, А.П. Силин, УФН 188, 1249 (2018).
- P. Miró, M. Audiffred, and T. Heine, Chem. Soc. Rev. 43, 6537 (2014).
- A.K. Geim and I.V. Grigorieva, Nature 499, 419 (2013).
- 4. Л. Н. Булаевский, УФН **116**, 449 (1975).
- 5. Л. Н. Булаевский, УФН 120, 259 (1976).
- 6. М.В. Дурнев, М.М. Глазов, УФН **188**, 913 (2018).
- 7. J. A. Wilson and A. D. Yoffe, Adv. Phys. 18, 193 (1969).
- В. Л. Калихман, Я.С. Уманский, УФН 108, 503 (1972).

- 9. А.П. Силин, ФТТ **20**, 3436 (1978).
- Л. А. Чернозатонский, А. А. Артюх, УФН 188, 3 (2018).
- Yiling Yu, Yifei Yu, Y. Cai, W. Li, A. Gurarslan, H. Peelaers, D. E. Aspnes, Ch. G. van de Walle, Nh. V. Nguyen, Y.-W. Zhang, and L. Cao, Sci. Rep. 5, 16996 (2016).
- Е. А. Андрюшин, Л. В. Келдыш, А. П. Силин, ЖЭТФ 73, 1163 (1977).
- Т. Райс, Дж. Хенсел, Т. Филлипс, Г. Томас, Электронно-дырочная жидкость в полупроводниках, Мир, М. (1980).
- Электронно-дырочные капли в полупроводниках, ред. К. Д. Джеффрис, Л. В. Келдыш, Наука, М. (1988).
- 15. С. Г. Тиходеев, УФН 145, 3 (1985).
- 16. Н. Н. Сибельдин, ЖЭТФ 149, 678 (2016).
- 17. Н. Н. Сибельдин, УФН 187, 1236 (2017).
- 18. Y. Yu, A.W. Bataller, R. Younts, Y. Yu, G. Li, A.A. Puretzky, D.B. Geohegan, K. Gundogdu, and L. Cao, ACS Nano 13, 10351 (2019).
- 19. Е.А. Андрюшин, А.П. Силин, ФТТ **21**, 839 (1979).
- Е. А. Андрюшин, В. С. Бабиченко, Л. В. Келдыш, Т. А. Онищенко, А. П. Силин, Письма в ЖЭТФ 24, 210 (1976).
- 21. Е.А. Андрюшин, А.П. Силин, ФТТ 18, 2130 (1976).
- E. A. Andryushin and A. P. Silin, Solid State Comm. 20, 453 (1976).
- 23. Н.С. Рытова, Вестн. Моск. ун-та, сер. 3, Физ. Астрон. **3**, 30 (1967).
- 24. Л.В. Келдыш, Письма в ЖЭТФ 29, 716 (1979).
- A. Rustagi and A.F. Kemper, Nano Lett. 18, 455 (2018).
- 26. Л.Е. Печеник, А.П. Силин, КСФ 5-6, 72 (1996).
- 27. Е.А. Андрюшин, Л.Е. Печеник, А.П. Силин, КСФ 7-8, 68 (1996).
- 28. А.П. Силин, С.В. Шубенков, ФТТ 42, 25 (2000).
- В. С. Бабиченко, И. Я. Полищук, Письма в ЖЭТФ 97, 726 (2013).
- 30. А.П. Силин, КСФ 5, 30 (1983).
- M. Combescot and P. Nozières, J. Phys. C 5, 2369 (1972).
- 32. Е.А. Андрюшин, А.П. Силин, ФТТ **19**, 1405 (1977).
- T. Eknapakul, P. D. C. King, M. Asakawa, P. Buaphet, R.-H. He, S.-K. Mo, H. Takagi, K. M. Shen, F. Baumberger, T. Sasagawa, S. Jungthawan, and W. Meevasana, Nano Lett. 14, 1312 (2014).
- T. C. Berkelbach, M. S. Hybertsen, and D. R. Reichman, Phys. Rev. B 88, 045318 (2013).