

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

П. Л. Пех<sup>+1)</sup>, П. В. Ратников\*, А. П. Силин<sup>+×</sup>

<sup>+</sup> Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

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

<sup>×</sup> 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,  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{WS}_2$  и  $\text{WSe}_2$ ) могут считаться идеальной системой для исследования высокотемпературной электронно-дырочной 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 дихалькогенидов 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 нанoeлектроники [1] привел к появлению новых двумерных (2D) материалов, таких как монослой гексагонального нитрида бора, черного фосфора и дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) [2]. В последнее время активно исследуются вертикальные (ван-дер-ваальсовы) гетероструктуры, в которых в заданной последовательности комбинируются различные 2D материалы [3].

Особый интерес представляют мономолекулярные слои ДПМ, описываемых формулой  $\text{MX}_2$ , где  $M$  – переходный металл,  $X$  – халькоген. Наиболее изученными являются полупроводники с атомами металла VI группы ( $M = \text{Mo}, \text{W}$ ) и S, Se, Te в качестве халькогена. В объемной форме слоистые ДПМ (например,  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{WS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{WSe}_2$ ) 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 ( $M = \text{Nb}, \text{Ta}, \text{Ti}, \text{Mo}$ ;  $X = \text{S}, \text{Se}$ ) 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  $\text{MoS}_2$   $E_x = 420$  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  $|E_{\text{ЕНЛ}}| \sim \sim E_x$ , а критическая температура фазового перехода газ–жидкость  $T_c \sim 0.1 |E_{\text{ЕНЛ}}|$  [12–17], поэтому можно ожидать, что в монослоях ДПМ ЭДЖ будет наблюдаться даже при комнатных температурах. В монослоях  $\text{MoS}_2$  уже наблюдалась высокотемпературная сильносвязанная ЭДЖ с  $T_c \simeq 500$  К [18].

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

<sup>1)</sup>e-mail: pavel.pekh@phystech.edu

диэлектрической подложке в вакууме. Считаем, что полупроводник обладает достаточно широкой энергетической щелью  $E_g \gg |E_{\text{ЕНЛ}}|$  и используем однозонное приближение. Полупроводник имеет большое одинаковое число эквивалентных электронных  $\nu_e$  и дырочных  $\nu_h$  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  $n_{\text{ЕНЛ}}$  и соответствующая этой плотности энергия  $E_{\text{ЕНЛ}}$  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]

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

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  $\mathbf{p}$  и спином  $s$  в долинах  $k$  и  $l$  соответственно. Законы дисперсии электрона и дырки

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

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]

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

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

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

Для монослойной пленки ( $d \rightarrow 0$ ) формула (3) дает стандартное выражение для кулоновского взаимодействия носителей заряда в 2D системе

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

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  $\epsilon$  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 MoS<sub>2</sub>.

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

$$E_{\text{gs}} = E_{\text{кин}} + E_{\text{exch}} + E_{\text{corr}}. \quad (5)$$

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

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

Второе слагаемое – обменная энергия

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

Третье слагаемое – корреляционная энергия (ее определим ниже). Мы ввели безразмерное расстояние между частицами  $r_s = \sqrt{\nu/\pi n_{2\text{D}}}$ . Волновой вектор Ферми равен  $q_F = \sqrt{2\pi n_{2\text{D}}/\nu} = \sqrt{2}/r_s$ . 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  $E_{\text{corr}}$  была рассчитана 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, причем основной вклад в  $E_{\text{corr}}$  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]

$$E_{\text{corr}} = \int_0^{\infty} I(q) dq. \quad (8)$$

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

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

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

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

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 ( $\tilde{r}_s = \nu r_s$ )

$$q_0 = \frac{9 \cdot 2^{1/4} \tilde{r}_s^2 - 3\pi \tilde{r}_s^{3/2} + \frac{15\pi}{27} \tilde{r}_s^{1/2} - 2^{1/4}}{2^{5/4} \tilde{r}_s^2 + 3\pi \tilde{r}_s^{3/2} - 2^{7/4} (\pi + 2) \tilde{r}_s + \frac{45\pi}{27} \tilde{r}_s^{1/2} - 2^{5/4}}. \quad (11)$$

Из формулы (10) можно получить оценку снизу для корреляционной энергии при больших  $\nu$

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

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  $E_{\text{corr}}$  почти не меняет результат (красные звездочки и черные точки практически совпадают). При больших  $\nu$  корреляционная энергия стремится к оценке (12). На этом же рисунке приведен результат численного расчета зависимости энергии основного состояния  $E_{\text{gs}}$  от  $\nu$ .

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

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

корреляционная энергия дается выражением

$$E_{\text{corr}} = -\frac{1}{n_{2D}} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \mathcal{F}(\mathbf{q}, \omega; \lambda), \quad (14)$$

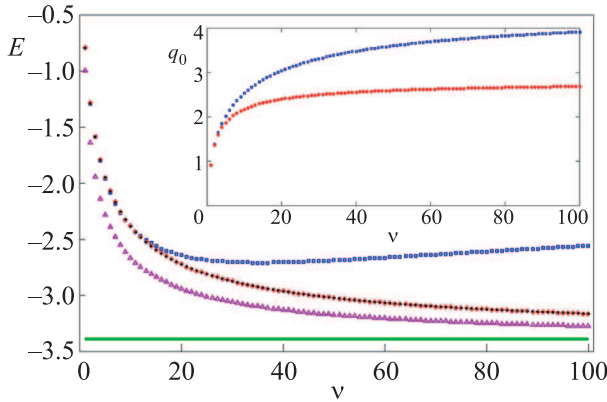


Рис. 1. (Цветной онлайн) Численные расчеты зависимости корреляционной энергии и энергии основного состояния от числа долин: синие квадратики – расчет  $E_{\text{corr}}$  по формулам (10)–(11); красные звездочки – расчет  $E_{\text{corr}}$  по формуле (10) с численным решением уравнения на  $q_0$ ; черные точки – расчет  $E_{\text{corr}}$  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  $E_{\text{gs}}$  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 ( $\omega \gg E_F$ )

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

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  $\sigma$  выражается как

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

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 функции  $A(\sigma)$  представлен на рис. 2. Ее удобно аппроксимировать выражением

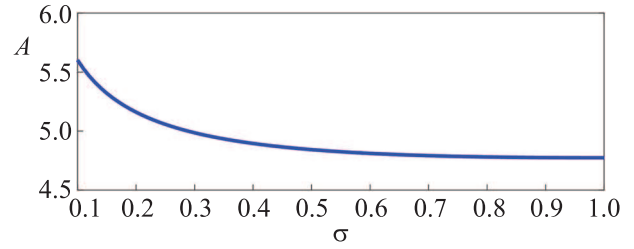


Рис. 2. (Цветной онлайн) Численный расчет  $A(\sigma)$

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

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  $\nu \rightarrow \infty$  оценка (12) остается оценкой снизу для  $E_{\text{corr}}$ . 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 ( $\rho_0 = r_0 q_F$ )

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

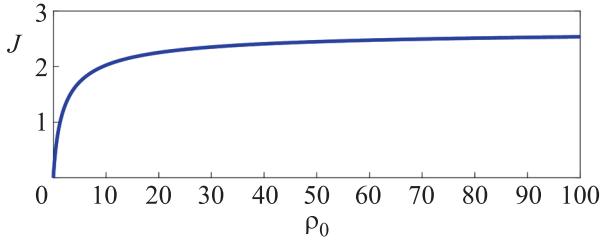
где введена функция

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

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  $\rho_0$  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

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

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  $E_{\text{corr}}^K$ . Оно весьма длинное и ради краткости мы его не приводим. Однако отметим, что при больших  $\nu$ , 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  $\rho_0$  как

$$E_{\text{corr}}^K = E_{\text{corr}} + \delta E_{\text{corr}}^K, \quad (19)$$

где  $E_{\text{corr}}$  дается выражением (10), а поправка  $\delta E_{\text{corr}}^K$  в линейном приближении по  $\rho_0$  равна

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

#### 4. Равновесные плотность и энергия ЭДЖ.

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

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

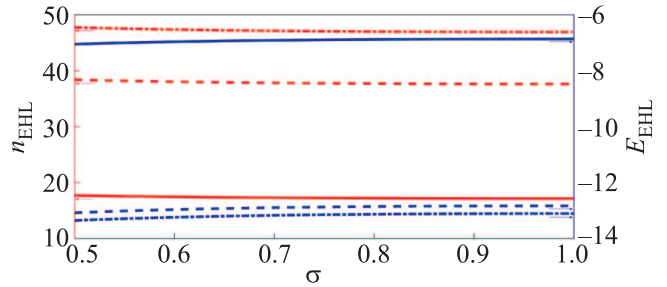
Чтобы решить уравнение (20), заметим, что для  $\nu \gg 1$  обменная энергия (7) по модулю существенно меньше, чем кинетическая и корреляционная (по модулю) энергии. Поэтому сначала можно пренебречь вторым слагаемым в (20), а затем найти поправку к равновесной плотности на обменную энергию:

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

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

Перспективными на наш взгляд являются многослойные многодолинные системы (число слоев  $l$ , расстояние между слоями  $c$ ). Если  $d = lc \lesssim a_x$ , то можно пренебречь вторым слагаемым в знаменателе (3). В этом случае можно использовать формулу (4). Эффективная многослойность  $\nu_{\text{eff}} = l\nu$  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 ( $\nu_{\text{eff}} = 20$ ) приведено на рис. 4.

Рис. 4. (Цветной онлайн) Результаты расчетов  $n_{\text{EHL}}$  (выделено красным цветом) и  $E_{\text{EHL}}$  (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  $n_{\text{EHL}}$ ,  $|E_{\text{EHL}}|$  и  $T_c$  для монослойной пленки  $\text{MoS}_2$  [18]. С хорошей точностью можно положить  $m_e \approx m_h$  [33]. Если  $\nu = 2$ , то  $|E_{\text{EHL}}| = 700$  мэВ,  $n_{\text{EHL}} = 10^{14} \text{ см}^{-2}$  и  $T_c \simeq 800$  К. Экспериментальные значения:  $|E_{\text{EHL}}| = 480$  мэВ,  $n_{\text{EHL}} = 4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$  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:  $|E_{\text{EHL}}| = 450$  мэВ,  $n_{\text{EHL}} = 3.3 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$  и  $T_c = 520$  К.

*Второе объяснение:* необходимо использовать потенциал Келдыша, который содержит подгоночный

параметр  $r_0$ . При  $r_0 = 0.7 \text{ \AA}$  и  $\nu = 2$  обеспечивается наилучшее согласие расчетного значения энергии ЭДЖ  $|E_{\text{ЕНЛ}}| = 480 \text{ мэВ}$  с экспериментальным значением, однако при этом мы получаем завышенное значение  $n_{\text{ЕНЛ}} = 5.4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ .

При количественном описании положения экситонных линий в спектре фотолюминесценции монослоя  $\text{MoS}_2$   $r_0 = 41.47 \text{ \AA}$  [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).
2. P. Miró, M. Audiffred, and T. Heine, Chem. Soc. Rev. **43**, 6537 (2014).
3. 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).
8. В. Л. Калихман, Я. С. Уманский, УФН **108**, 503 (1972).

9. А. П. Силин, ФТТ **20**, 3436 (1978).
10. Л. А. Чернозатонский, А. А. Артюх, УФН **188**, 3 (2018).
11. 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).
12. Е. А. Андриюшин, Л. В. Келдыш, А. П. Силин, ЖЭТФ **73**, 1163 (1977).
13. Т. Райс, Дж. Хенсел, Т. Филлипс, Г. Томас, *Электронно-дырочная жидкость в полупроводниках*, Мир, М. (1980).
14. *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. Puzetky, D. B. Geohegan, K. Gundogdu, and L. Cao, ACS Nano **13**, 10351 (2019).
19. Е. А. Андриюшин, А. П. Силин, ФТТ **21**, 839 (1979).
20. Е. А. Андриюшин, В. С. Бабиченко, Л. В. Келдыш, Т. А. Онищенко, А. П. Силин, Письма в ЖЭТФ **24**, 210 (1976).
21. Е. А. Андриюшин, А. П. Силин, ФТТ **18**, 2130 (1976).
22. Е. А. Andryushin and A. P. Silin, Solid State Comm. **20**, 453 (1976).
23. Н. С. Рыгова, Вестн. Моск. ун-та, сер. 3, Физ. Астрон. **3**, 30 (1967).
24. Л. В. Келдыш, Письма в ЖЭТФ **29**, 716 (1979).
25. 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. Андриюшин, Л. Е. Печеник, А. П. Силин, КСФ **7–8**, 68 (1996).
28. А. П. Силин, С. В. Шубенков, ФТТ **42**, 25 (2000).
29. В. С. Бабиченко, И. Я. Полищук, Письма в ЖЭТФ **97**, 726 (2013).
30. А. П. Силин, КСФ **5**, 30 (1983).
31. M. Combescot and P. Nozières, J. Phys. C **5**, 2369 (1972).
32. Е. А. Андриюшин, А. П. Силин, ФТТ **19**, 1405 (1977).
33. 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).
34. T. C. Berkelbach, M. S. Hybertsen, and D. R. Reichman, Phys. Rev. B **88**, 045318 (2013).