ЖЭТФ, 2024, том 166, вып. 5 (11), стр. 710–726 © 2024

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНАЯ ЖИДКОСТЬ В МОНОСЛОЙНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ДИХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

П. В. Ратников [a]*

[a] *Институт общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук*
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 мая 2024 г.,
после переработки 12 июля 2024 г.
Принята к публикации 18 июля 2024 г.

Рассмотрена возможность возникновения диэлектрической электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ) в монослоях дихалькогенидов переходных металлов и гетероструктурах на их основе. Показано, что когерентное спаривание электронов и дырок в них приводит к образованию диэлектрической ЭДЖ при превышении степени циркулярной поляризации возбуждающего света определенного порогового значения. Ниже этого значения реализуется металлическая ЭДЖ. Отмечены некоторые возможные физические проявления перехода между этими двумя типами ЭДЖ.

DOI: 10.31857/S0044451024110142

1. ВВЕДЕНИЕ

Последние два десятилетия физика двумерных (2D) материалов, в частности, дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ), привлекает внимание многих исследователей. ДПМ являются слоистыми материалами и описываются химической формулой MX_2, где M — атом переходного металла (обычно M=Mo, W) и X — атом халькогена (X=S, Se, Te). Подобно расщеплению графита на слои графена [1] ДПМ можно расщепить на тонкие пленки. Пленка наименьшей толщины состоит из двух слоев атомов X, между которыми вставлен слой атомов M. Такие пленки принято называть монослоями ДПМ.

Особенности зонной структуры делают монослои ДПМ привлекательными для использования их в долиннотронике [2]. В них оказывается возможным селективное по долинам возбуждение электрон-дырочных пар в зависимости от типа циркулярной поляризации света: при поглощении правополяризованного света оптические переходы идут в одной долине, а для левополяризованного — в другой [3].

Предположение о существовании диэлектрической электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ) было высказано в работе [4]. Такое состояние может реализоваться за счет когерентного спаривания электронов и дырок.

В первых теоретических работах, посвященных вычислению энергии основного состояния ЭДЖ (см., например, обзор [5]), в качестве нулевого приближения использовался свободный электронно-дырочный газ, энергия которого обращается в нуль в пределе нулевой плотности, а не стремится к энергии экситона. Это указывало на некорректный учет электрон-дырочных корреляций в области малых плотностей носителей заряда.

Давно известно, что металлическое состояние оказывается неустойчивым из-за электрон-дырочных корреляций, что приводит к открытию энергетической щели на поверхности Ферми, величина которой при нулевой плотности совпадает с энергией связи экситона [6]. Оценка вклада электрон-дырочных корреляций в энергию ЭДЖ при введении металлической экранировки была сделана в работе [7]. Однако и это приближение выглядит неудовлетворительным.

В работе [8] впервые было показано, что когерентное спаривание электронов и дырок в трехмерных (3D) полупроводниках с изотропными зонами приводит к образованию диэлектрической ЭДЖ. Для построения нулевого приближения системы электронов и дырок, взаимодействующих по закону

* E-mail: ratnikov@lpi.ru

Кулона, было использовано каноническое преобразование [9].

В настоящей работе нами исследована диэлектрическая ЭДЖ в монослоях ДПМ и гетероструктурах на их основе с учетом специфики их зонной структуры. Нами адаптировано к этой задаче каноническое преобразование и показано, что диэлектрическая ЭДЖ может быть более энергетически выгодной, чем металлическая, за счет уменьшения кратности вырождения носителей заряда.

2. МОДЕЛЬНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Гамильтониан системы электронов и дырок, взаимодействующих по закону Кулона, с учетом особенности зонной структуры монослоев ДПМ имеет вид, аналогичный гамильтониану в работе [9]

$$\begin{aligned}\widehat{H} =& \sum_{\mathbf{p}s\tau} \left(\varepsilon^e_{\mathbf{p}} - \mu_e\right) a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau} a_{\mathbf{p}sK_\tau} + \\ &+ \sum_{\substack{\mathbf{p}s \\ \tau=\mathrm{sgn}(s)}} \left(\varepsilon^h_{\mathbf{p}} - \mu_h\right) b^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau} b_{\mathbf{p}sK_\tau} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{pp'k} \\ ss'\tau\tau'}} V_{\mathbf{k}} a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau} a^\dagger_{\mathbf{p'}s'K_{\tau'}} a_{\mathbf{p'}+\mathbf{k}s'K_{\tau'}} a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_\tau} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{pp'k}ss' \\ \tau=\mathrm{sgn}(s) \\ \tau'=\mathrm{sgn}(s')}} V_{\mathbf{k}} b^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau} b^\dagger_{\mathbf{p'}s'K_{\tau'}} b_{\mathbf{p'}+\mathbf{k}s'K_{\tau'}} b_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_\tau} - \\ &- \sum_{\substack{\mathbf{pp'k} \\ ss'\tau \\ \tau'=\mathrm{sgn}(s')}} V_{\mathbf{k}} a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau} b^\dagger_{\mathbf{p'}s'K_{\tau'}} b_{\mathbf{p'}+\mathbf{k}s'K_{\tau'}} a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_\tau}. \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau}$ ($a_{\mathbf{p}sK_\tau}$) и $b^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau}$ ($b_{\mathbf{p}sK_\tau}$) — операторы рождения (уничтожения) электронов и дырок с квазиимпульсом $\mathbf{p}$ и проекцией спина s ($s = \pm 1/2$) в долине точки зоны Бриллюэна K_τ, $\tau = \pm$ — долинный индекс (для дырок он совпадает со знаком проекции спина $\mathrm{sgn}(s)$, что явно отражено в (1)); $\mu_{e(h)}$ — химический потенциал электронов (дырок), определяемый условием

$$\sum_{\mathbf{p}s\tau} \langle a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau} a_{\mathbf{p}sK_\tau} \rangle = \sum_{\substack{\mathbf{p}s \\ \tau=\mathrm{sgn}(s)}} \langle b^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau} b_{\mathbf{p}sK_\tau} \rangle = n, \tag{2}$$

где n — 2D-плотность электронов и дырок[1)], $\langle\ \rangle$ означает усреднение по основному состоянию.

Кулоновское взаимодействие выбирается в виде потенциала Келдыша[2)] [10,11]

$$V_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|(1 + r_0|\mathbf{k}|)} \tag{3}$$

с параметром экранирования r_0, который определяется наилучшим совпадением расчетной энергии связи экситона в пределе нулевой плотности с экспериментально измеренной.

Законы дисперсии носителей заряда

$$\varepsilon^e_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{1+\sigma}, \quad \varepsilon^h_{\mathbf{p}} = \frac{\sigma \mathbf{p}^2}{1+\sigma}, \quad \sigma = \frac{m_e}{m_h}. \tag{4}$$

Мы используем систему единиц с $e^2/\varepsilon_{\mathrm{eff}} = \hbar = 2m = 1$, где $\varepsilon_{\mathrm{eff}} = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2$ — эффективная статическая диэлектрическая проницаемость, определяемая диэлектрическими проницаемостями сред, окружающих монослой ДПМ (например, вакуум и подложка); $m = m_e m_h/(m_e + m_h)$ — приведенная масса электрона (с эффективной массой m_e) и дырки (с эффективной массой m_h). Как и ранее [13], мы полагаем в гамильтониане (1) m_e и m_h не зависящими от s и τ.

Энергия связи 2D-экситона с обычным кулоновским взаимодействием $2\pi e^2/\varepsilon_{\mathrm{eff}}|\mathbf{k}|$ принята нами в качестве единицы измерения энергии E и температуры T

$$E_x = \frac{2me^4}{\hbar^2 \varepsilon^2_{\mathrm{eff}}}, \tag{5}$$

а в качестве единицы измерения расстояния — его боровский радиус

$$a_x = \frac{\hbar^2 \varepsilon_{\mathrm{eff}}}{2me^2}. \tag{6}$$

2D-плотность частиц n измеряется в единицах a_x^{-2}. Площадь системы полагаем равной единице.

При переводе величин в размерные используется ранее примененный нами прием [12], когда вычисленные безразмерные значения плотности делятся

[1)] В случае неравного заселения долин следует ввести 2D-плотности частиц n_+ в долине точки K_+ и n_- в долине точки K_- ($n_+ + n_- = n$):

$$\sum_{\mathbf{p}s} \langle a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\pm} a_{\mathbf{p}sK_\pm} \rangle = \sum_{\mathbf{p}} \langle b^\dagger_{\mathbf{p}\pm\frac{1}{2}K_\pm} b_{\mathbf{p}\pm\frac{1}{2}K_\pm} \rangle = n_\pm.$$

Неравное заселение долин достигается при возбуждении светом со степенью циркулярной поляризации, отличной от 0. Если она стремится к 1, монослой ДПМ ведет себя как однодолинный полупроводник.

[2)] Ранее для металлической ЭДЖ нами был принят обычный кулоновский 2D-потенциал, что дало весьма хорошее согласие с экспериментом. При этом для расчетов экситонов использовался потенциал Келдыша. Для обоснования такого выбора потребовались дополнительные аргументы (см. наши работы [12,13]). Здесь же исходным состоянием (при $n \to 0$) является разреженный экситонный газ и для него следует взять потенциал (3).

на квадрат численно найденного боровского радиуса, а энергия (температура) умножается на численно найденную энергию связи экситона. Боровский радиус и энергия связи экситона зависят от диэлектрического окружения монослоев ДПМ. Для одного и того же материала монослоя безразмерные величины одни и те же, но их размерные значения зависят от ε_{eff}. В частности, размерные ответы для монослоя ДПМ на подложке SiO_2 и того же монослоя, инкапсулированного тонкими слоями гексагонального нитрида бора, различны (во втором варианте равновесная плотность, энергия связи ЭДЖ, критическая температура перехода газ–жидкость меньше).

Отметим некоторые допущения, сделанные при выборе гамильтониана (1).

Во-первых, мы полагали процессы рассеяния электронов и дырок с переворотом спина подавленными благодаря отсутствию магнитного момента атомов, составляющих кристалл, и магнитных примесей. Следует, однако, отметить, что процессы переворота спина могут быть разрешены в бислоях ДПМ, которые составлены из двух монослоев, при переходе носителей заряда между монослоями в поперечном электрическом поле [14].

В гамильтониане (1) учтена специфика зонной структуры монослоев ДПМ. Напомним, что имеется большое спин-орбитальное расщепление валентной зоны $\Delta_v \gtrsim 100$ мэВ [15]. Расщепление зоны проводимости составляет $\Delta_c = 1-30$ мэВ [16,17]. Последним можно пренебречь при температурах, сравнимых с комнатной, считая электроны вырожденными по спину. При энергии возбуждающих фотонов $\hbar\omega$ в пределах $E_g < \hbar\omega < E_g + \Delta_v$ (E_g — зонная щель) дырки рождаются только на верхних спиновых ветвях валентной зоны: со спином вверх в долине точки K_+ и со спином вниз в долине точки K_- (см. рис. 1). Таким образом, суммирование по проекциям спина дырок в (1) эквивалентно суммированию по долинам.

Отметим, что порядок следования спиновых ветвей в зоне проводимости, показанный на рис. 1, для определенности принят таким, какой он имеется в системах с молибденом; в системах же с вольфрамом порядок следования обратный [3]. Но это не оказывает влияния на окончательные ответы из-за того, что температура считается заметно превышающей спиновое расщепление зоны проводимости.

Во-вторых, мы не принимали явно в расчет процессы междолинного переброса носителей заряда. Волновые функции носителей из разных долин ортогональны, а матричные элементы, отвечающие процессам междолинного переброса, малы по сравнению с матричными элементами, оставленными нами в гамильтониане (1) [18]. Однако, в отношении монослоев ДПМ известно, что долинная поляризация экситонов теряется очень быстро вследствие обменного взаимодействия электронов и дырок [3].

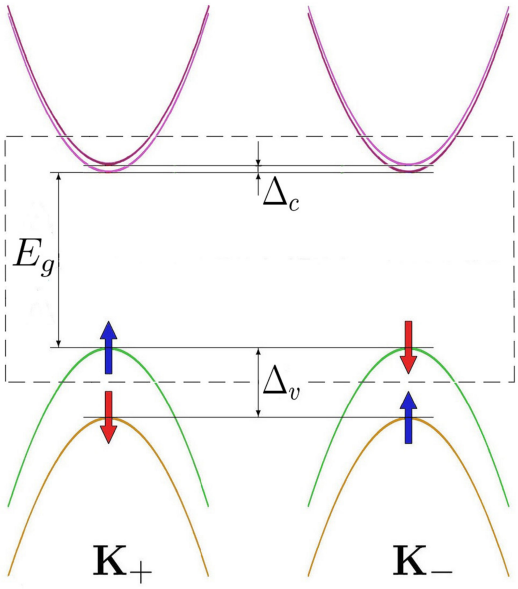

Рис. 1. (В цвете онлайн) Зонная структура монослоев ДПМ. Показаны нижняя зона проводимости и верхняя валентная зона при двух точках K_+ и K_-. Стрелками указаны спиновые ориентации ветвей валетной зоны. Спиновое расщепление валентной зоны равно Δ_v. Ввиду малого расщепления по спину в зоне проводимости Δ_c спиновые ветви в ней выделены тоном: более светлые соответствуют спину вверх, более темные — спину вниз. Зонная щель равна E_g. Штриховыми линиями отмечены ветви, заселяемые при фотовозбуждении

В-третьих, мы не учитывали явным образом рекомбинацию электронов и дырок. Хотя она была учтена косвенно в выборе основного состояния системы взаимодействующих электронов и дырок в виде разреженного экситонного газа. При этом более низколежащими по энергии, чем экситоны, являются биэкситоны и трионы[3)]. Однако из-за конечности времени жизни всех типов частиц (как свободных носителей, так и составных) число биэкси-

[3)] Например, в инкапсулированных нитридом бора монослоях WSe_2 энергия связи биэкситона (т. е. выигрыш энергии при образовании биэкситона по отношению к энергии двух экситонов) равна 17 мэВ [19], что составляет $\simeq 10\%$ от энергии связи экситона $E_b^{(exc)} = 167 \pm 3$ мэВ [20], в то время как энергия связи внутридолинного электронного триона (т.е. выигрыш энергии при захвате экситоном электрона) составляет 35 мэВ [19], что $\simeq 20\%$ от $E_b^{(exc)}$.

тонов и трионов мало́ по сравнению с числом экситонов, поскольку они не успевают образоваться из вторых в большом количестве в течение малых времен жизни. Эти соображения подтверждаются тем, что гашение экситонных линий в спектре фотолюминесценции монослоев ДПМ происходит при достаточно высокой интенсивности фотовозбуждения и электронном (дырочном) легировании (превышение числа одних носителей над числом других носителей составляло вплоть до $\sim 10^{13}$ см$^{-2}$) [21–23].

С другой стороны, вопрос о стабильности основного состояния в 2D-случае качественно подобен таковому в 3D-случае. В области плотностей $n_B \lesssim n \lesssim n_{dm}$ ($n_B \simeq 10^{-3}$ — плотность, при которой состояние, построенное из биэкситонов становится неустойчивым; n_{dm} — плотность перехода металл–диэлектрик) основное состояние системы электронов и дырок, взаимодействующих по закону Кулона, построено из экситонов [4, 24].

В дальнейшем предполагается, что плотность n попадает в указанный выше интервал плотностей (плотность n_{dm} для монослоев ДПМ была нами рассчитана в предыдущей работе [13]). Основное состояние, построенное из трионов, реализуется в условиях электронного (дырочного) легирования (см. также работы [21–23,25]). В рассматриваемом нами случае такого легирования нет.

Равновесное состояние успевает установиться, если время жизни носителей заряда существенно превышает время термализации [26].

Среднее время между двумя последовательными столкновениями $\sim 1/(n^{1/2}v_T)$ (v_T — тепловая скорость носителей или экситонов). По нашим расчетам, представленным ниже, $n \simeq 10^{10}$ см$^{-2}$. Для эффективных масс носителей заряда $m^*_{e,h} \simeq 0.5m_0$ (m_0 — масса свободного электрона) и температуры, сравнимой с комнатной, $v_T \simeq 10^7$ см/с, откуда среднее время между столкновениями ~ 1 пс. Откуда время образования диэлектрической ЭДЖ можно оценить как $\gtrsim 10$ пс.

В области малых температур присущее время излучательной рекомбинации (intrinsic radiative decay time) оказывается ~ 1 пс, а в высокотемпературной области вводится эффективное излучательное время жизни (effective radiative lifetime), которое уже на три порядка величины больше первого, ~ 1 нс [27, 28]. Мы видим, что критерий малости времени термализации (образования диэлектрической ЭДЖ) по сравнению с временем рекомбинации выполняется с большим запасом в области высоких температур. Причем сначала формируются экситоны, а затем из них образуется диэлектрическая ЭДЖ, поскольку время релаксации экситонов всегда меньше указанных первых двух времен — оно субпикосекундного масштаба [29].

Рекомбинация также качественно учитывается, когда подразумевается динамическое равновесие между числом рождаемых электрон-дырочных пар в режиме непрерывного фотовозбуждения и рекомбинируемых частиц. Это позволяет считать n заданной величиной.

Зонная щель полупроводниковых монослоев ДПМ $E_g \simeq 2$ эВ [3] велика по сравнению с характерными значениями энергии (например, энергия связи экситона не превосходит 0.4 эВ [20, 30–32]), поэтому мы используем однозонное приближение.

3. КОГЕРЕНТНОЕ СПАРИВАНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК

Как указано выше, основное состояние системы электронов и дырок, взаимодействующих по закону Кулона, построено из экситонов. Для учета этого положения сделаем каноническое преобразование [9] гамильтониана (1)

$$\Lambda_{\mathbf{p}} = SL_{\mathbf{p}}S^{\dagger}, \tag{7}$$

где для удобства записи введены следующие столбцы операторов:

$$L_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} A_{\mathbf{p}+} \\ A_{\mathbf{p}-} \\ B_{\mathbf{p}} \end{pmatrix},$$

$$A_{\mathbf{p}\tau} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{p}+\frac{1}{2}K_\tau} \\ a_{\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_\tau} \end{pmatrix},$$

$$B_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} b^{\dagger}_{-\mathbf{p}+\frac{1}{2}K_+} \\ b^{\dagger}_{-\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_-} \end{pmatrix}.$$

Столбец $\Lambda_{\mathbf{p}}$ составлен из «новых» фермиевских операторов, которые для отличия их от «старых» операторов обозначаем соответствующими греческими буквами с теми же индексами и в том же порядке, что и в столбце $L_{\mathbf{p}}$.

В случае равного заселения долин[4)] унитарный оператор S определяется как

$$S = \exp\left\{\frac{i}{\sqrt{2}}\sum_{\mathbf{p}\tau} L^{\dagger}_{\mathbf{p}\tau}\widehat{F}_{\mathbf{p}}L_{\mathbf{p}\tau}\right\}, \tag{8}$$

[4)] Случай неравного заселения долин рассмотрен ниже отдельно.

где

$$L_{\mathbf{p}\tau} = \begin{pmatrix} A_{\mathbf{p}\tau} \\ B_{\mathbf{p}} \end{pmatrix},$$
$$\widehat{F}_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} O & \widehat{\Phi}_{\mathbf{p}} \\ \widehat{\Phi}^{\dagger}_{\mathbf{p}} & O \end{pmatrix},$$
$$\widehat{\Phi}_{\mathbf{p}} = -i \begin{pmatrix} \delta_{\mathbf{p}} & \gamma_{\mathbf{p}} \\ \gamma_{\mathbf{p}} & \delta_{\mathbf{p}} \end{pmatrix},$$

$\gamma_{\mathbf{p}}$ и $\delta_{\mathbf{p}}$ — функции квазиимпульса, определяющиеся из условия минимальности энергии и устойчивости основного состояния системы.

Прямыми вычислениями находим

$$\Lambda_{\mathbf{p}} = \widehat{R}_{\mathbf{p}} L_{\mathbf{p}}, \tag{9}$$

где матрица 6×6

$$\widehat{R}_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(M_{\mathbf{p}} + I) & \frac{1}{2}(M_{\mathbf{p}} - I) & N_{\mathbf{p}} \\ \frac{1}{2}(M_{\mathbf{p}} - I) & \frac{1}{2}(M_{\mathbf{p}} + I) & N_{\mathbf{p}} \\ -N_{\mathbf{p}} & -N_{\mathbf{p}} & M_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}$$

задается матрицами 2×2 (I — единичная матрица)

$$M_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \cos\gamma_{\mathbf{p}} \cos\delta_{\mathbf{p}} & -\sin\gamma_{\mathbf{p}} \sin\delta_{\mathbf{p}} \\ -\sin\gamma_{\mathbf{p}} \sin\delta_{\mathbf{p}} & \cos\gamma_{\mathbf{p}} \cos\delta_{\mathbf{p}} \end{pmatrix},$$

$$N_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos\gamma_{\mathbf{p}} \sin\delta_{\mathbf{p}} & \sin\gamma_{\mathbf{p}} \cos\delta_{\mathbf{p}} \\ \sin\gamma_{\mathbf{p}} \cos\delta_{\mathbf{p}} & \cos\gamma_{\mathbf{p}} \sin\delta_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}.$$

Возможны два типа спаривания: синглетное $\gamma_{\mathbf{p}} = \varphi_{\mathbf{p}}$ и $\delta_{\mathbf{p}} \equiv 0$ (суммарный спин электрона и дырки $\widetilde{S} = 0$) или триплетное $\gamma_{\mathbf{p}} \equiv 0$ и $\delta_{\mathbf{p}} = \varphi_{\mathbf{p}}$ ($\widetilde{S} = 1$). Операторы принимают вид

$$\begin{aligned} &\alpha_{\mathbf{p}sK_\tau} = \\ &= \frac{1}{2}(\cos\varphi_{\mathbf{p}} + 1)\, a_{\mathbf{p}sK_\tau} + \frac{1}{2}(\cos\varphi_{\mathbf{p}} - 1)\, a_{\mathbf{p}sK_{-\tau}} + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\varphi_{\mathbf{p}} \left(\delta_{\widetilde{S}0} b^{\dagger}_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} + \delta_{\widetilde{S}1} b^{\dagger}_{-\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}} \right), \\ &\beta_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}} = \cos\varphi_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}} - \\ &- \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\varphi_{\mathbf{p}} \left[\delta_{\widetilde{S}0} \left(a^{\dagger}_{-\mathbf{p}-sK_+} + a^{\dagger}_{-\mathbf{p}-sK_-} \right) + \right. \\ &\left. + \delta_{\widetilde{S}1} \left(a^{\dagger}_{-\mathbf{p}sK_+} + a^{\dagger}_{-\mathbf{p}sK_-} \right) \right]. \end{aligned} \tag{10}$$

Матрица $\widehat{R}_{\mathbf{p}}$ является, как это и должно быть, матрицей поворота. В частности, непосредственным вычислением получается $\det \widehat{R}_{\mathbf{p}} \equiv 1$. Чтобы показать, какой поворот она осуществляет при конкретном типе спаривания, введем столбцы

$$\widetilde{L}_{\mathbf{p}s} = \begin{pmatrix} \widetilde{L}_{\mathbf{p}s+} \\ \widetilde{L}_{\mathbf{p}s-} \end{pmatrix}, \quad \widetilde{L}_{\mathbf{p}s\pm} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{p}sK_+} \\ a_{\mathbf{p}sK_-} \\ b^{\dagger}_{-\mathbf{p}\pm sK_{\pm\mathrm{sgn}(s)}} \end{pmatrix},$$
$$\widetilde{\Lambda}_{\mathbf{p}s} = \begin{pmatrix} \widetilde{\Lambda}_{\mathbf{p}s+} \\ \widetilde{\Lambda}_{\mathbf{p}s-} \end{pmatrix}, \quad \widetilde{\Lambda}_{\mathbf{p}s\pm} = \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{p}sK_+} \\ \alpha_{\mathbf{p}sK_-} \\ \beta^{\dagger}_{-\mathbf{p}\pm sK_{\pm\mathrm{sgn}(s)}} \end{pmatrix}.$$

Знак «+» в $\widetilde{L}_{\mathbf{p}s}$ и $\widetilde{\Lambda}_{\mathbf{p}s}$ соответствует триплетному спариванию, знак «−» — синглетному спариванию. Тогда преобразование (10) перепишется

$$\widetilde{\Lambda}_{\mathbf{p}s} = \widehat{R}'_{\mathbf{p}} \widetilde{L}_{\mathbf{p}s}, \quad \widehat{R}'_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}_{\mathbf{p}} & O \\ O & \mathcal{R}_{\mathbf{p}} \end{pmatrix},$$

где матрица

$$\mathcal{R}_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\cos\varphi_{\mathbf{p}} + 1) & \frac{1}{2}(\cos\varphi_{\mathbf{p}} - 1) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\varphi_{\mathbf{p}} \\ \frac{1}{2}(\cos\varphi_{\mathbf{p}} - 1) & \frac{1}{2}(\cos\varphi_{\mathbf{p}} + 1) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\varphi_{\mathbf{p}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin\varphi_{\mathbf{p}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin\varphi_{\mathbf{p}} & \cos\varphi_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}$$

является матрицей поворота в трехмерном пространстве на угол $\varphi_{\mathbf{p}}$ вокруг оси, лежащей в плоскости xy под углом $-\pi/4$ к оси x. Матрица $\widehat{R}'_{\mathbf{p}}$ отличается от матрицы $\widehat{R}_{\mathbf{p}}$ лишь четной перестановкой строк и столбцов.

С точки зрения теории групп представление матрицами $\widehat{R}'_{\mathbf{p}}$ подгруппы вращений в шестимерном пространстве, индуцированной рассматриваемым каноническим преобразованием, является прямой суммой двух представлений подгруппы вращений в трехмерном пространстве, в которую входят только вращения вокруг одной определенной оси.

Гамильтониан (1) после преобразования (7) принимает вид[5] [9, 24]

$$\widehat{\mathcal{H}} = S\widehat{H}S^{\dagger} = \widetilde{U}\{\varphi_{\mathbf{p}}\} + \widehat{\mathcal{H}}_0 + \widehat{\mathcal{H}}_i - \mu n, \tag{11}$$

где $\mu = \mu_e + \mu_h$, $\widetilde{U}\{\varphi_{\mathbf{p}}\}$ — числовой функционал, возникающий от приведения гамильтониана к нормальному виду:

$$\begin{aligned} \widetilde{U}\{\varphi_{\mathbf{p}}\} =& 2\sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} \sin^2\varphi_{\mathbf{p}} - \\ &- 2\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \left(\sin^2\varphi_{\mathbf{p}} \sin^2\varphi_{\mathbf{p}'} + \right. \\ &\left. + \cos\varphi_{\mathbf{p}} \sin\varphi_{\mathbf{p}} \cos\varphi_{\mathbf{p}'} \sin\varphi_{\mathbf{p}'} \right), \end{aligned} \tag{12}$$

[5] Забегая вперед, укажем, что для выделения последнего члена в (11) было использовано равенство (16).

где $\varepsilon_{\mathbf{p}} = \varepsilon^e_{\mathbf{p}} + \varepsilon^h_{\mathbf{p}}$. Двойки возникли из-за суммирования по s.

Операторы $\widehat{\mathcal{H}}_0$ и $\widehat{\mathcal{H}}_i$ приведены в Приложении А.

Плотность «новых» квазичастиц должна определяться таким же образом, как и плотность исходных квазичастиц (2):

$$\sum_{\mathbf{p}s\tau}\langle\alpha^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau}\alpha_{\mathbf{p}sK_\tau}\rangle = \sum_{\mathbf{p}s}\langle\beta^\dagger_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}\beta_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}\rangle = n. \tag{13}$$

Подставив выражения «новых» операторов (10) в (13) и взяв полусумму обеих сумм в (13), находим

$$\begin{aligned}&\sum_{\mathbf{p}s\tau}\left[\frac{1}{2}\cos^2\varphi_{\mathbf{p}}\langle a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau}a_{\mathbf{p}sK_\tau}\rangle - \right.\\ &-\frac{1}{2}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}}\langle a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau}a_{\mathbf{p}sK_{-\tau}}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\varphi_{\mathbf{p}}\sin\varphi_{\mathbf{p}}\times\\ &\times\Big(\delta_{\widetilde{S}0}\langle a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau}b^\dagger_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} + b_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}a_{\mathbf{p}sK_\tau}\rangle +\\ &+\delta_{\widetilde{S}1}\langle a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau}b^\dagger_{-\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}} + b_{-\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}a_{\mathbf{p}sK_\tau}\rangle\Big) +\\ &\left.+\frac{1}{4}\cos 2\varphi_{\mathbf{p}}\langle b^\dagger_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}b_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}\rangle + \frac{1}{2}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}}\right] = n.\end{aligned} \tag{14}$$

Средние значения $\langle a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau}a_{\mathbf{p}sK_\tau}\rangle$ и $\langle b^\dagger_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}b_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}\rangle$ равны нулю: все уровни одночастичных ферми-возбуждений $|\mathbf{p}sK_\tau\rangle$ (электроны) и $|\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}\rangle$ (дырки) лежат выше μ_e и μ_h и для «новых» квазичастиц состояния не заняты [9]. Второй и третий члены в (14) также можно положить равными нулю, поскольку мы можем воспользоваться произволом в выборе функции $\varphi_{\mathbf{p}}$ и ввести для нее условие подобно работе [9]

$$\begin{aligned}&\langle a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau}a_{\mathbf{p}sK_{-\tau}}\rangle = \langle a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau}b^\dagger_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}\rangle =\\ &= \langle b_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}a_{\mathbf{p}sK_\tau}\rangle = \langle a^\dagger_{\mathbf{p}sK_\tau}b^\dagger_{-\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}\rangle =\\ &= \langle b_{-\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}a_{\mathbf{p}sK_\tau}\rangle = 0.\end{aligned} \tag{15}$$

Таким образом, приходим к равенству

$$2\sum_{\mathbf{p}}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}} = n. \tag{16}$$

При выполнении (15) средние $\langle\widehat{\mathcal{H}}_0\rangle$ и $\langle\widehat{\mathcal{H}}_i\rangle$ равны нулю. Это означает, что в самосогласованном приближении энергия системы определяется минимизацией числового функционала (12).

Чтобы условие (16) было учтено автоматически, перейдем от суммирования по $\mathbf{p}$ к интегрированию по $q = p/\widetilde{p}$ по аналогии с 3D-случаем [24]

$$\widetilde{p} = \frac{1}{p_0}\sqrt{\frac{2\pi n}{\nu_e}}, \tag{17}$$

где

$$p_0 = \sqrt{\frac{2}{\nu_e}\int\limits_0^\infty\frac{qdq}{1+z_q^2}}, \quad z_q = \operatorname{ctg}\varphi_q.$$

Энергия E_0, приходящаяся на одну электрон-дырочную пару, находится путем минимизации функционала

$$\begin{aligned}E_0\{z_q\} &= \frac{4}{\nu_e r_s^2 p_0^4}\int\limits_0^\infty\frac{q^3dq}{1+z_q^2} -\\ &-\frac{8\sqrt{2}}{\pi\nu_e r_s p_0^3}\int\limits_0^\infty\frac{q^2dq}{1+z_q^2}\int\limits_0^1\frac{1+z_qz_{q\xi}}{1+z_{q\xi}^2}\times\\ &\times\left[K(\xi) - \frac{1}{1+\xi}\widetilde{K}\left(\frac{2\sqrt{\xi}}{1+\xi};\,\widetilde{r}_0q(1+\xi)\right)\right]\xi d\xi,\end{aligned} \tag{18}$$

где введено среднее расстояние между электронами

$$r_s = \sqrt{\frac{\nu_e}{\pi n}},$$

$K(k)$ — полный эллиптический интеграл первого рода, введена функция

$$\widetilde{K}(k;\,\rho) = \int\limits_0^{\pi/2}\frac{\rho dx}{\rho\sqrt{1-k^2\sin^2 x}+1},$$

которая в пределе $\rho\to\infty$ переходит в $K(k)$, и введено обозначение $\widetilde{r}_0 = r_0\widetilde{p}$.

В качестве пробных функций выбирались функции вида

$$z_q = A(1+q^2)^\alpha + B \tag{19}$$

с вариационными параметрами A и B, $\alpha\approx 2$ (обычно $\alpha = 1.94-1.97$).

Расчет корреляционных поправок, связанных с многократным рождением и уничтожением электрон-дырочных пар, проводился по методу Нозьера–Пайнса [8, 33]. Ранее этим методом нами была рассчитана корреляционная энергия для металлической ЭДЖ в гетероструктурах на основе основе монослоев ДПМ [12, 13]. Существенным отличием нынешних расчетов является использование потенциала (3) также при вычислении корреляционного вклада. Ввиду громоздкости формул и отсутствия принципиально новых результатов мы не приводим здесь соответствующие выражения. Отметим к тому же, что этот вклад в области малых n оказывается малым по сравнению с обменным вкладом (по модулю). Типичная зависимость E_0 (после минимизации функционала (12)) от n представлена на рис. 2 *a*. Видно, что в случае

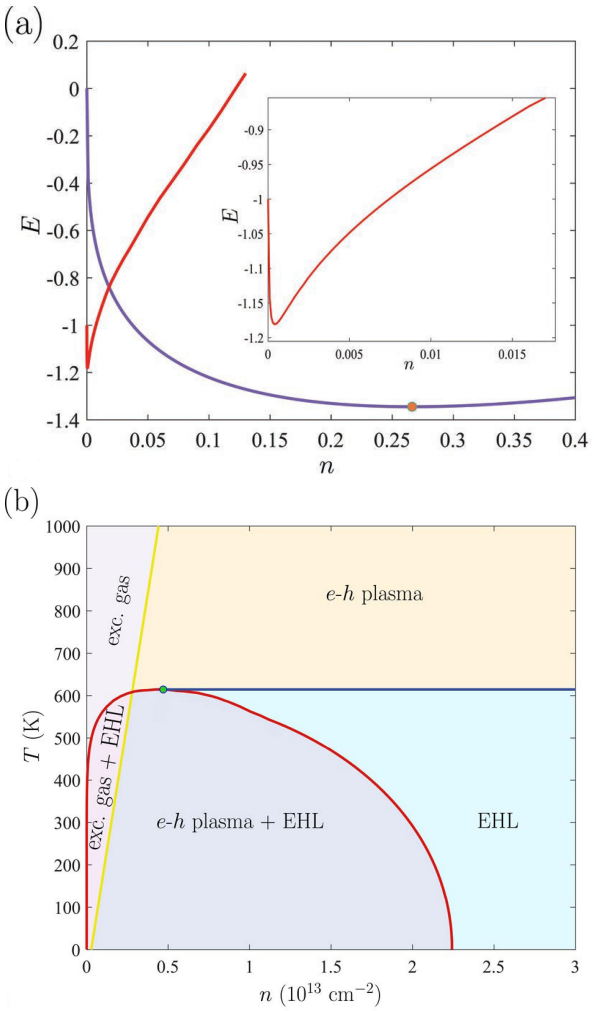

Рис. 2. (В цвете онлайн) *a* — Зависимость энергии диэлектрической ЭДЖ (красная кривая) и металлической ЭДЖ (светло-синяя кривая) от плотности носителей заряда n в монослое MoS_2 на подложке SiO_2 в случае равного заселения долин. Желтой точкой отмечен минимум энергии металлической ЭДЖ (ее энергия связи со знаком минус). На вставке показан увеличенный участок хода кривой для диэлектрической ЭДЖ. *b* — Фазовая диаграмма металлической ЭДЖ в той же гетероструктуре. Красная кривая — кривая сосуществования газ–жидкость, в вершине которой находится критическая точка (отмечена зеленым цветом). Желтая кривая соответствует температурной зависимости плотности перехода металл–диэлектрик, расчетные данные взяты из работы [13]. Обозначения: exc. gas — экситонный газ; EHL — ЭДЖ; e-h plasma — электрон-дырочная плазма

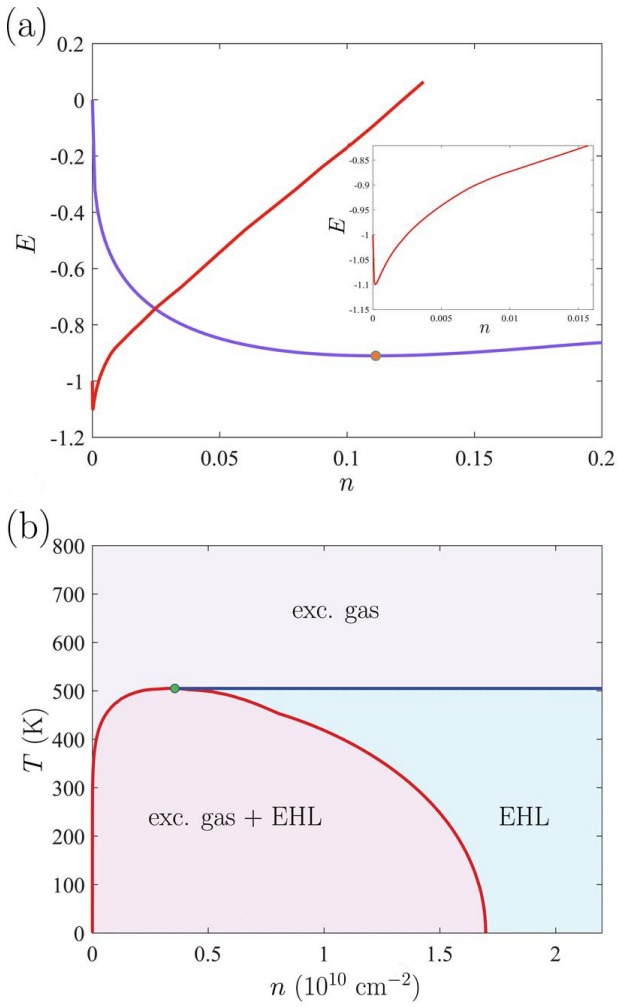

Рис. 3. (В цвете онлайн) *a* — Зависимость энергии диэлектрической ЭДЖ (красная кривая) и металлической ЭДЖ (светло-синяя кривая) от плотности носителей заряда n в монослое MoS_2 на подложке SiO_2 в случае заселения одной долины. Желтой точкой отмечен минимум энергии металлической ЭДЖ (ее энергия связи со знаком минус). На вставке показан увеличенный участок хода кривой для диэлектрической ЭДЖ. *b* — Фазовая диаграмма диэлектрической ЭДЖ в той же гетероструктуре. Кривая плотности перехода металл–диэлектрик располагается значительно правее ($\sim 10^{11} - 10^{12}$ см$^{-2}$) и имеет значение только для области выше синей прямой, когда $T > T_c$

равного заселения долин энергетически выгодной оказывается металлическая ЭДЖ. На рис. 2 *b* приведена фазовая диаграмма металлической ЭДЖ, расчет которой был проведен в работе [13].

4. НЕРАВНОЕ ЗАСЕЛЕНИЕ ДОЛИН

В унитарном операторе (8) мы должны явно учесть различие между долинами при точке K_+ (она заселена электрон-дырочными парами с плотностью n_+) и при точке K_- (плотность пар n_-). Это означает, что в выражении, стоящем в экспоненте (8), нам следует выделить разные функции

для когерентного спаривания электронов и дырок, когда они оба находятся в долине при точке K_+ или в долине при точке K_-, либо одна частица находится в одной долине, а другая частица — в другой долине. Например, члену $\gamma_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_+} b^\dagger_{-\mathbf{p}+\frac{1}{2}K_+}$, который описывает процесс рождения электрон-дырочной пары в долине при точке K_+ с синглетным спариванием, следует сопоставить член $\gamma^{(+)}_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_+} b^\dagger_{-\mathbf{p}+\frac{1}{2}K_+}$, а члену $\gamma_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_-} b^\dagger_{-\mathbf{p}+\frac{1}{2}K_-}$ (рождение пары в долине при точке K_-) — член $\gamma^{(-)}_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}\frac{1}{2}K_-} b^\dagger_{-\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_-}$; в случае междолинного спаривания — член $\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}+\frac{1}{2}K_+} b^\dagger_{-\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_-}$ или $\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_-} b^\dagger_{-\mathbf{p}+\frac{1}{2}K_+}$. Аналогично для триплетного спаривания:

$$\begin{aligned}
&\delta_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}+\frac{1}{2}K_+} b^\dagger_{-\mathbf{p}+\frac{1}{2}K_+} \to \delta^{(+)}_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}+\frac{1}{2}K_+} b^\dagger_{-\mathbf{p}+\frac{1}{2}K_+},\\
&\delta_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_-} b^\dagger_{-\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_-} \to \delta^{(-)}_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_-} b^\dagger_{-\mathbf{p}-\frac{1}{2}K_-},\\
&\delta_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}\pm\frac{1}{2}K_\mp} b^\dagger_{-\mathbf{p}\pm\frac{1}{2}K_\pm} \to \widetilde{\delta}_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}\pm\frac{1}{2}K_\mp} b^\dagger_{-\mathbf{p}\pm\frac{1}{2}K_p m}.
\end{aligned}$$

Для процессов уничтожения пар замены производятся таким же образом.

В соответствии с этими заменами матрица $\widehat{F}_{\mathbf{p}}$ в (8) становится зависящей от долинного индекса:

$$\begin{aligned}
\widehat{F}_{\mathbf{p}\tau} &= \begin{pmatrix} O & \widehat{\Phi}_{\mathbf{p}\tau} \\ \widehat{\Phi}^\dagger_{\mathbf{p}\tau} & O \end{pmatrix},\\
\widehat{\Phi}_{\mathbf{p}+} &= -i \begin{pmatrix} \delta^{(+)}_{\mathbf{p}} & \widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}} \\ \gamma^{(+)}_{\mathbf{p}} & \widetilde{\delta}_{\mathbf{p}} \end{pmatrix},\\
\widehat{\Phi}_{\mathbf{p}-} &= -i \begin{pmatrix} \widetilde{\delta}_{\mathbf{p}} & \gamma^{(-)}_{\mathbf{p}} \\ \widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}} & \delta^{(-)}_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Рассмотрим синглетное спаривание. «Новые» операторы выражаются через «старые» следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{p}sK_+} \\ \alpha_{\mathbf{p}sK_-} \\ \beta^\dagger_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} \end{pmatrix} = M_{\mathrm{sgn}(s)} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{p}sK_+} \\ a_{\mathbf{p}sK_-} \\ b^\dagger_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} \end{pmatrix}, \quad (20)$$

где матрица поворота $M_{\mathrm{sgn}(s)}$ зависит от двух углов (она приведена в Приложении Б). Угол $\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}$ определяет положение оси вращения в плоскости xy (она лежит под углом $-\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}$ к оси x, причем $0 < \phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}} < {}^{\pi}/_{2}$), а угол $\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}$ является углом поворота вокруг нее. Эти величины выражаются через введенные нами функции следующим образом:

$$\begin{aligned}
\varphi^{(\pm)}_{\mathbf{p}} &= \sqrt{\frac{\widetilde{\gamma}^2_{\mathbf{p}} + \gamma^{(\mp)2}_{\mathbf{p}}}{2}},\\
\cos\phi^{(+)}_{\mathbf{p}} &= \frac{\gamma^{(-)}_{\mathbf{p}}}{\sqrt{\widetilde{\gamma}^2_{\mathbf{p}} + \gamma^{(-)2}_{\mathbf{p}}}},\\
\cos\phi^{(-)}_{\mathbf{p}} &= \frac{\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}}}{\sqrt{\widetilde{\gamma}^2_{\mathbf{p}} + \gamma^{(+)2}_{\mathbf{p}}}}.
\end{aligned} \quad (21)$$

Для триплетного спаривания, когда вместо $\beta^\dagger_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}$ и $b^\dagger_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}$ в (20) стоят соответственно $\beta^\dagger_{-\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}$ и $b^\dagger_{-\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}$, функции $\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}$ и $\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}$ выберем так, чтобы матрица $M_{\mathrm{sgn}(s)}$ осталась той же:

$$\begin{aligned}
\varphi^{(\pm)}_{\mathbf{p}} &= \sqrt{\frac{\widetilde{\delta}^2_{\mathbf{p}} + \delta^{(\pm)2}_{\mathbf{p}}}{2}},\\
\cos\phi^{(+)}_{\mathbf{p}} &= \frac{\widetilde{\delta}_{\mathbf{p}}}{\sqrt{\widetilde{\delta}^2_{\mathbf{p}} + \delta^{(+)2}_{\mathbf{p}}}},\\
\cos\phi^{(-)}_{\mathbf{p}} &= \frac{\delta^{(-)}_{\mathbf{p}}}{\sqrt{\widetilde{\delta}^2_{\mathbf{p}} + \delta^{(-)2}_{\mathbf{p}}}}.
\end{aligned} \quad (22)$$

Соотношения (21) и (22) раскрывают взаимную зависимость углов $\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}$ и $\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}$ соответственно для синглетного и триплетного типа спаривания.

Выражения (10) обобщаются на случай неравного заселения долин следующим образом:

$$\begin{aligned}
\alpha_{\mathbf{p}sK_\tau} &= \frac{1}{2}\Big(1 + \tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}} +\\
&+ \Big(1 - \tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}\Big)\cos\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}\Big) a_{\mathbf{p}sK_\tau} +\\
&+ \frac{1}{2}\sin 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}\Big(\cos\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}} - 1\Big) a_{\mathbf{p}sK_{-\tau}} +\\
&+ \sqrt{\frac{1 - \tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}}{2}}\sin\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}} \times\\
&\times \Big(\delta_{\widetilde{S}0} b^\dagger_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} + \delta_{\widetilde{S}1} b^\dagger_{-\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}\Big),\\
\beta_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}} &= \cos\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}} -\\
&- \sin\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}} \sum_\tau \sqrt{\frac{1 - \tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}}{2}} \times\\
&\times \Big(\delta_{\widetilde{S}0} a^\dagger_{-\mathbf{p}-sK_\tau} + \delta_{\widetilde{S}1} a^\dagger_{-\mathbf{p}sK_\tau}\Big).
\end{aligned} \quad (23)$$

Если положить $\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}} \equiv {}^{\pi}/_{4}$, то мы возвращаемся к формулам (10).

Отметим особенность «новых» квазичастиц, следующую из формул (20)–(23). Для разных проекций

спина s спаривание электрона и дырки (как синглетное, так и триплетное) происходит по-разному — они описываются разными поворотами. Это является отражением того факта, что ансамбль «старых» квазичастиц исходно был частично спинполяризованным (число дырок со спином вверх не равно числу дырок со спином вниз при неравном заселении долин).

Преобразованный гамильтониан $\widehat{\mathcal{H}} = S\widehat{H}S^{\dagger}$ имеет вид

$$\widehat{\mathcal{H}} = \widetilde{U}\left\{\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)},\, \phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\right\} + \widehat{\mathcal{H}}_0 + \widehat{\mathcal{H}}_i - \mu n. \qquad (24)$$

Первый член в (24) является обобщением числового функционала (12)

$$\begin{aligned}\widetilde{U}\left\{\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)},\, \phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\right\} &= \sum_{\mathbf{p}s}\varepsilon_{\mathbf{p}}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} - \\ &- \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'s} V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}\left[\frac{1}{2}\left(1+\cos^2\left(\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} - \phi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\right)\times\right. \\ &\times \sin^2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))} + \\ &+ \cos\left(\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} - \phi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\times \\ &\left.\times\cos\varphi_{\mathbf{p}}\sin\varphi_{\mathbf{p}}\cos\varphi_{\mathbf{p}'}\sin\varphi_{\mathbf{p}'}\right]. \qquad (25)\end{aligned}$$

Операторы $\widehat{\mathcal{H}}_0$ и $\widehat{\mathcal{H}}_i$ приведены в Приложении В.

При выполнении равенств (15) условие (16) в случае неравного заселения долин принимает вид

$$\sum_{\mathbf{p}s}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} = n. \qquad (26)$$

Чтобы учесть соотношение между плотностями носителей заряда n_+ и n_-, принадлежащими долинам при точках K_+ и K_-, соответственно, необходимо переписать (26) более детально [согласно примечанию [1)]]

$$\sum_{\mathbf{p}s}\langle\alpha^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\pm}\alpha_{\mathbf{p}sK_\pm}\rangle = \sum_{\mathbf{p}}\langle\beta^{\dagger}_{\mathbf{p}\pm\frac{1}{2}K_\pm}\beta_{\mathbf{p}\pm\frac{1}{2}K_\pm}\rangle = n_\pm. \qquad (27)$$

После подстановки (23) в (27) получаем равенства

$$\begin{aligned}\sum_{\mathbf{p}s}\sin^2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} &= n_+, \\ \sum_{\mathbf{p}s}\cos^2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} &= n_-.\end{aligned} \qquad (28)$$

Перейдем от суммирования по $\mathbf{p}$ к интегрированию по $q = p/\widetilde{p}$. Величина $\widetilde{p}$ определяется по соотношению (17) с p_0, теперь равным

$$p_0 = \frac{1}{\sqrt{\nu_e}}\sqrt{\int_0^\infty\frac{qdq}{1+z_{q+}^2} + \int_0^\infty\frac{qdq}{1+z_{q-}^2}}$$

с функциями $z_{q\pm} = \mathrm{ctg}\,\varphi_q^{(\pm)}$.

Энергия электрон-дырочной пары определяется минимизацией функционала

$$\begin{aligned}&E_0\left\{z_{q+},\, z_{q-};\, \phi_q^{(+)},\, \phi_q^{(-)}\right\} = \\ &= \frac{2}{\nu_e r_s^2 p_0^4}\sum_s\int_0^\infty\frac{q^3dq}{1+z^2_{q\mathrm{sgn}(s)}} - \\ &- \frac{2\sqrt{2}}{\pi\nu_e r_s p_0^3}\sum_s\int_0^\infty\frac{q^2dq}{1+z^2_{q\mathrm{sgn}(s)}}\int_0^1\frac{1}{1+z^2_{q\xi\mathrm{sgn}(s)}}\times \qquad (29)\\ &\times\left(1+\cos^2\left(\phi_q^{(\mathrm{sgn}(s))} - \phi_{q\xi}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right) + \right. \\ &\left.+2\cos\left(\phi_q^{(\mathrm{sgn}(s))} - \phi_{q\xi}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)z_{q\mathrm{sgn}(s)}z_{q\xi\mathrm{sgn}(s)}\right)\times \\ &\times\left[K(\xi) - \frac{1}{1+\xi}\widetilde{K}\left(\frac{2\sqrt{\xi}}{1+\xi};\, \widetilde{r}_0 q(1+\xi)\right)\right]\xi d\xi.\end{aligned}$$

Пробные функции $z_{q\pm}$ выбираются аналогично (19) соответственно с вариационными параметрами $A_\pm$ и $B_\pm$. Функции $\phi_q^{(\pm)}$ выбираются согласно соотношениям (21) или (22) [с точностью до переобозначений оба соотношения приводят к одинаковому результату]

$$\phi_q^{(\pm)} = \arccos\left(\frac{\mathrm{arcctg}\left[A^{(\pm)}(1+q^2)^\alpha + B^{(\pm)}\right]}{\sqrt{2}\,\mathrm{arcctg}\left[A_\pm(1+q^2)^\alpha + B_\pm\right]}\right). \qquad (30)$$

При этом использовано предположение о подобии функций $\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}}$ и $\gamma_{\mathbf{p}}^{(\pm)}$ ($\widetilde{\delta}_{\mathbf{p}}$ и $\delta_{\mathbf{p}}^{(\pm)}$).

Значения параметров $A^{(\pm)}$ и $B^{(\pm)}$ ограничены по отношению к значениям параметров $A_\pm$ и $B_\pm$ условием непревышения дроби в (30) единицы. Также они ограничены условиями (28).

Корреляционные поправки считаются таким же способом, что и при равном заселении долин. Ввиду их малости мы считаем такое приближение допустимым.

5. ПЕРЕХОД МЕЖДУ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЭДЖ

Как показывают численные расчеты (см. рис. 2), при равном заселении долин металлическая ЭДЖ в монослойных гетероструктурах на основе ДПМ всегда оказывается более энергетически выгодной, чем диэлектрическая ЭДЖ, что согласуется с нашими предыдущими результатами [12, 13]. Однако из работы [13] также можно увидеть, что имеется существенная зависимость энергии связи металлической ЭДЖ от числа долин: для однодолинного полупроводника (при условии спинового вырождения и

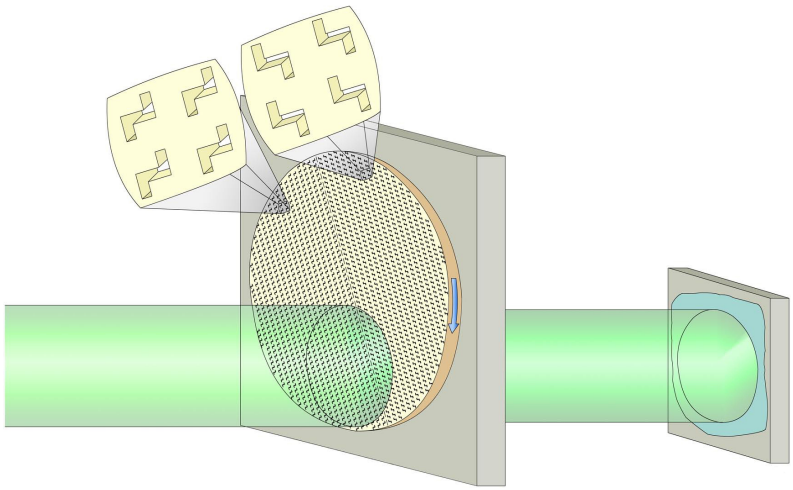

Рис. 4. (В цвете онлайн) Вращающийся диск с перфорированной алмазной мембраной толщиной в несколько микрон, позади которого расположен столик с облучаемым образцом (выделен цветом морской волны). Отверстия в мембране имеют ось вращения C_2. Одна половина диска представляет собой поляризатор для правополяризованного света, а вторая половина — поляризатор для левополяризованного света. Массив отверстий одного поляризатора переходит в таковой другого поляризатора операцией зеркального отражения относительно плоскости, проходящей через разделяющий их диаметр (показан штрихами). Теоретическое исследование оптического отклика неподвижной свободно висящей алмазной мембраны с двумерным периодическим массивом отверстий с осью вращения C_2 для инфракрасных приложений было проведено в работе [36]

электронов, и дырок) она превосходит энергию связи экситона лишь на 9%. Это наводит на мысль, что дальнейшее уменьшение кратности вырождения за счет снятия спинового вырождения для дырок приведет к еще меньшему значению энергии связи металлической ЭДЖ.

Введем степень циркулярной поляризации света

$$P_e = \frac{|I_+ - I_-|}{I_+ + I_-}, \tag{31}$$

где I_+ и I_- — интенсивности право-поляризованной и лево-поляризованной компонент света, соответственно. Значение $P_e = 0$ отвечает случаю линейной поляризации или неполяризованному свету, а $P_e = 1$ — полностью циркулярно-поляризованному свету. В определении (31) поставлен модуль, поскольку наша задача инвариантна относительно двойной замены $I_+ \rightleftarrows I_-$ (важна пропорция заселенностей долин).

В численных расчетах удобно оперировать эффективным числом долин для электронов

$$\nu_e^* = 1 + \min\left\{\frac{n_-}{n_+}, \frac{n_+}{n_-}\right\}. \tag{32}$$

При преобладании оптических переходов в долине точки K_+ к ним добавляется относительно меньшая доля переходов в долине точки K_-: первые дают 1 в ν_e^*, а вторые — отношение заселенностей n_-/n_+ ($n_+ > n_-$). Наоборот, если переходы преобладают в долине точки K_-, они дают 1, а переходы в долине точки K_+ — отношение заселенностей n_+/n_- ($n_- > n_+$).

Воспользовавшись зависимостью $n_\pm \propto I_\pm$, перепишем определение (31) через заселенности

$$P_e = \frac{|n_+ - n_-|}{n_+ + n_-}. \tag{33}$$

Тогда эффективное число долин для электронов равно

$$\nu_e^* = \frac{2}{1 + P_e}. \tag{34}$$

Эффективное число долин для дырок всегда вдвое меньше, чем для электронов, из-за снятого вырождения по спину:

$$\nu_h^* = \frac{1}{1 + P_e}. \tag{35}$$

Численные расчеты показали, что для ряда монослоев ДПМ и гетероструктур на их основе при степени циркулярной поляризации возбуждающего света P_e, стремящейся к 1, металлическая ЭДЖ перестает существовать (ее энергия связи становится меньше энергии связи экситона). При этом энергия связи диэлектрической ЭДЖ уменьшается примерно на треть, но она остается энергетически выгодной по сравнению с экситоном (см. рис. 3).

Отсюда следует, что при некоторой разнице в заполнении долин, когда P_e лежит между 0 и 1, энергии связи обоих типов ЭДЖ сравниваются. Это означает, что имеется пороговое значение степени циркулярной поляризации возбуждающего излучения P_{e0}, ниже которого существует металлическая ЭДЖ, а выше — диэлектрическая ЭДЖ. Например, наши расчеты показали, что для MoS_2 $P_{e0} = 0.45$.

Для экспериментального наблюдения фазового перехода между двумя типами ЭДЖ можно использовать несколько схем. Первая схема с двумя источниками: один правополяризованного излучения, другой — левополяризованного. Изменение интенсивности обоих источников осуществляется синхронно так, чтобы суммарная интенсивность оставалась постоянной. Второй вариант — использовать один источник линейно-поляризованного света. Луч от него разделить на два луча, один из которых усилить с модуляцией интенсивности во времени, а затем сложить его со вторым (неусиленным). Таким путем можно получить излучение с модулированной во времени P_e. Также можно использовать электрооптический преобразователь — ячейку Поккельса. Тогда модуляция P_e задается переменным электрическим полем.

Для относительно малых частот модуляции (десятки и сотни Герц) помимо ячейки Поккельса можно также использовать вращающийся поляризатор в форме диска, одна половина которого преобразует лазерное излучение в правополяризованный свет, а вторая половина — в левополяризованный. Пятно падающего излучения смещено от оси диска (см. рис. 4). Когда луч полностью падает на одну из двух половин, прошедший свет имеет P_e, близкую к 1. Изменение степени циркулярной поляризации прошедшего света происходит на интервале времени, когда граница между двумя поляризаторами перемещается по пятну падающего на диск излучения (при делении пятна пополам можно считать, что прошедший свет не является циркулярно поляризованным).

Превышение P_e порогового значения P_{e0} будет приводить к распаду капель металлической ЭДЖ с образованием более «рыхлой» фазы — диэлектрической ЭДЖ. Наоборот, при уменьшении P_e, когда P_e станет меньше P_{e0}, будут вновь образовываться капли металлической ЭДЖ.

При переходе между двумя типами ЭДЖ качественно меняется спектр люминесценции. Ширина линии ЭДЖ порядка энергии Ферми E_F — при низких температурах она равна E_F с хорошей точностью, в то время как при комнатной температуре может превосходит ее примерно вдвое [35]. Металлической ЭДЖ соответствует широкая линия, а диэлектрической — достаточно узкая (в меру малости равновесной плотности). Таким образом, переход через пороговое значение степени циркулярной поляризации возбуждающего света P_{e0} должен сопровождаться резким изменением ширины линии, отстоящей от экситонной линии в красную сторону: при $P_e < P_{e0}$ линия широкая, а при $P_e > P_{e0}$ линия узкая.

При анализе формы линии фотолюминесценции ЭДЖ обычно используется стандартное выражение для интенсивности [37–40]

$$I(\omega) = A \int\int D_e(E_e) D_h(E_h) f_e(E_e) f_h(E_h) \times \times \delta\left(E_e + E_h + E_{g\mathrm{L}} - \Omega - \omega\right) dE_e dE_h, \tag{36}$$

где D_e и D_h — плотности состояний в зоне проводимости и валентной зоне, соответственно, f_e и f_h — фермиевские функции для электронов и дырок, E_e и E_h — энергии электронов и дырок, отсчитанные от краев соответствующих зон в жидкости, $E_{g\mathrm{L}}$ — величина перенормированной зонной щели в области образца, занимаемой жидкостью, $E_{g\mathrm{L}} = E_g^{(0)} + E_0 - E_F$ ($E_g^{(0)}$ — значение неперенормированной зонной щели, E_0 — энергия ЭДЖ на одну электрон-дырочную пару, E_F — энергия Ферми электронов и дырок), Ω — частота фонона, испускаемого при электронном переходе. Константа A имеет размерность, соответствующую размерности интенсивности, измеряемой на эксперименте. В случае прямозонных полупроводников, коими являются монослои ДПМ, наиболее вероятными являются переходы без участия фононов, поэтому можно положить $\Omega = 0$.

В идеализированной картине параболических зон вблизи экстремумов для 2D-случая значительно упрощаются расчеты по формуле (36). Интенсивность $I(\omega)$ находится аналитически [35]

$$\begin{aligned} I(\omega) = {} & \frac{A}{\pi^2} \nu_e \nu_h m_e m_h \times \\ & \times \frac{\left(e^{\frac{2\pi n_{\mathrm{L}}}{(1+\sigma)\nu_e T}} - 1\right)\left(e^{\frac{2\pi\sigma n_{\mathrm{L}}}{(1+\sigma)\nu_h T}} - 1\right)\theta\left(\omega - E_{g\mathrm{L}}\right)}{e^{(\omega - E_{g\mathrm{L}})/T} - \left(e^{\frac{2\pi n_{\mathrm{L}}}{(1+\sigma)\nu_e T}} - 1\right)\left(e^{\frac{2\pi\sigma n_{\mathrm{L}}}{(1+\sigma)\nu_h T}} - 1\right)} \times \\ & \times \left\{ T \ln\left[\left(e^{(\omega - E_{g\mathrm{L}})/T} + e^{\frac{2\pi n_{\mathrm{L}}}{(1+\sigma)\nu_e T}} - 1\right) \times \right.\right. \\ & \times \left.\left(e^{(\omega - E_{g\mathrm{L}})/T} + e^{\frac{2\pi\sigma n_{\mathrm{L}}}{(1+\sigma)\nu_h T}} - 1\right)\right] - \\ & \left. - \frac{\nu_h + \sigma\nu_e}{1+\sigma} \frac{2\pi n_{\mathrm{L}}}{\nu_e \nu_h} - \omega + E_{g\mathrm{L}} \right\}. \end{aligned} \tag{37}$$

Результат расчетов профиля линий в спектре фотолюминесценции по формуле (37) для монослоя MoS_2 приведены на рис. 5. Экситонная линия не рассчитывалась (ее положение показано желтыми штриховыми линиями по энергии связи экситона).

При характерных для образования металлической ЭДЖ интенсивностях возбуждающего света диэлектрическая ЭДЖ скорее всего будет заполнять весь образец, а не формироваться в виде отдельных капель, между которыми находится экситонный газ. В таком случае свободные экситоны отсутствуют, как и экситонная линия в спектре фотолюминесценции. Однако имеется линия рекомбинации диэлектрической ЭДЖ, которая может быть очень похожа по своему профилю интенсивности на экситонную линию, но она смещена в красную сторону на величину энергии связи диэлектрической ЭДЖ по отношению к свободному экситону.

При интенсивностях фотовозбуждения, когда плотность рождаемых электрон-дырочных пар n заметно превосходит равновесную плотность диэлектрической ЭДЖ $n_0^{(d)}$, «избыточные» электрон-дырочные пары конденсируются в капли металлической ЭДЖ, понижая плотность диэлектрической ЭДЖ до $n_0^{(d)}$. Возникает динамическое равновесие между каплями металлической ЭДЖ и диэлектрической ЭДЖ, занимающей всю остальную площадь образца, — скорость конденсации электрон-дырочных пар в капли металлической ЭДЖ равна скорости их испарения.

Такое сосуществование двух типов ЭДЖ приводит к существованию обеих линий в спектре фотолюминесценции (см. рис. 5 *c*). Расчеты показали, что линии хорошо спектроскопически различимы вплоть до температур, сравнимых с комнатной. Линия рекомбинации металлической ЭДЖ смещена в красную сторону по отношению к линии рекомбинации диэлектрической ЭДЖ и между ними всегда имеется провал интенсивности вследствие того, что пороговое значение частоты с красной стороны $E_{g\mathrm{L}}$ для обоих типов ЭДЖ с хорошей точностью равно энергии Ферми металлической ЭДЖ (энергия Ферми диэлектрической ЭДЖ мала по сравнению с ней, а энергии жидкости E_0 близки).

Наблюдение отдельно стоящей линии диэлектрической ЭДЖ может оказаться весьма проблематичным из-за малого значения $n_0^{(d)}$ — электрон-дырочные пары не успевают сконденсироваться в эту фазу. Существует поэтому естественный порог по интенсивности, начиная с которого появляется соответствующая линия в спектре фотолюминесценции. При этом плотность n может сильно превосходить $n_0^{(d)}$, что и приводит к указанному выше сосуществованию двух типов ЭДЖ и характерному для него профилю линии.

Экспериментальные исследования ЭДЖ в монослойных гетероструктурах на основе ДПМ [42–45], по-видимому, проведены с низкой степенью циркулярной поляризации или с линейной поляризацией возбуждающего света, когда энергетически выгодной оказывается металлическая ЭДЖ. Эксперименты убедительно продемонстрировали металлический характер наблюдавшейся фазы. Мы предсказываем, что, если использовать для возбуждения образца свет с достаточно высокой степенью циркулярной поляризации, возникнет качественно новый профиль соответствующей линии, описанный нами выше.

Наконец отметим, что фазовые диаграммы обоих типов ЭДЖ становятся зависящими от значения степени циркулярной поляризации P_e, т.е. они представляют собой поверхности в пространстве (n, P_e, T). Как показали наши расчеты для MoS_2, равновесная плотность диэлектрической ЭДЖ изменяется почти в 1.5 раза при изменении P_e от P_{e0} до 1. Однако на эксперименте такие изменения практически не заметны. Энергия связи изменяется с 367 мэВ до 353 мэВ, а критическая температура — с 525 K до 504 K (второе значение представлено на рис. 3 *b*). Последнее хорошо измеряется на эксперименте, однако относительное изменение все же весьма мало́. Такая картина типична для монолоев ДПМ. По нашему мнению, в свете этого построение фазовых диаграмм в виде поверхностей выглядит несколько избыточным. В особенности это становится ясным, если принять во внимание, что точность расчетов все же не позволяет различать столь малые относительные изменения, какие получаются для энергии связи и критической температуры.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мы показали, что диэлектрическая ЭДЖ оказывается возможной в монослоях ДПМ и гетероструктурах на их основе благодаря когерентному спариванию электронов и дырок. Для построения правильного нулевого приближения использовано адаптированное соответствующим образом каноническое преобразование. Численными расчетами показано, что в случае равного заселения долин металлическая ЭДЖ более энергетически выгодна, чем диэлектрическая ЭДЖ. Однако в случае неравного заселения долин, когда

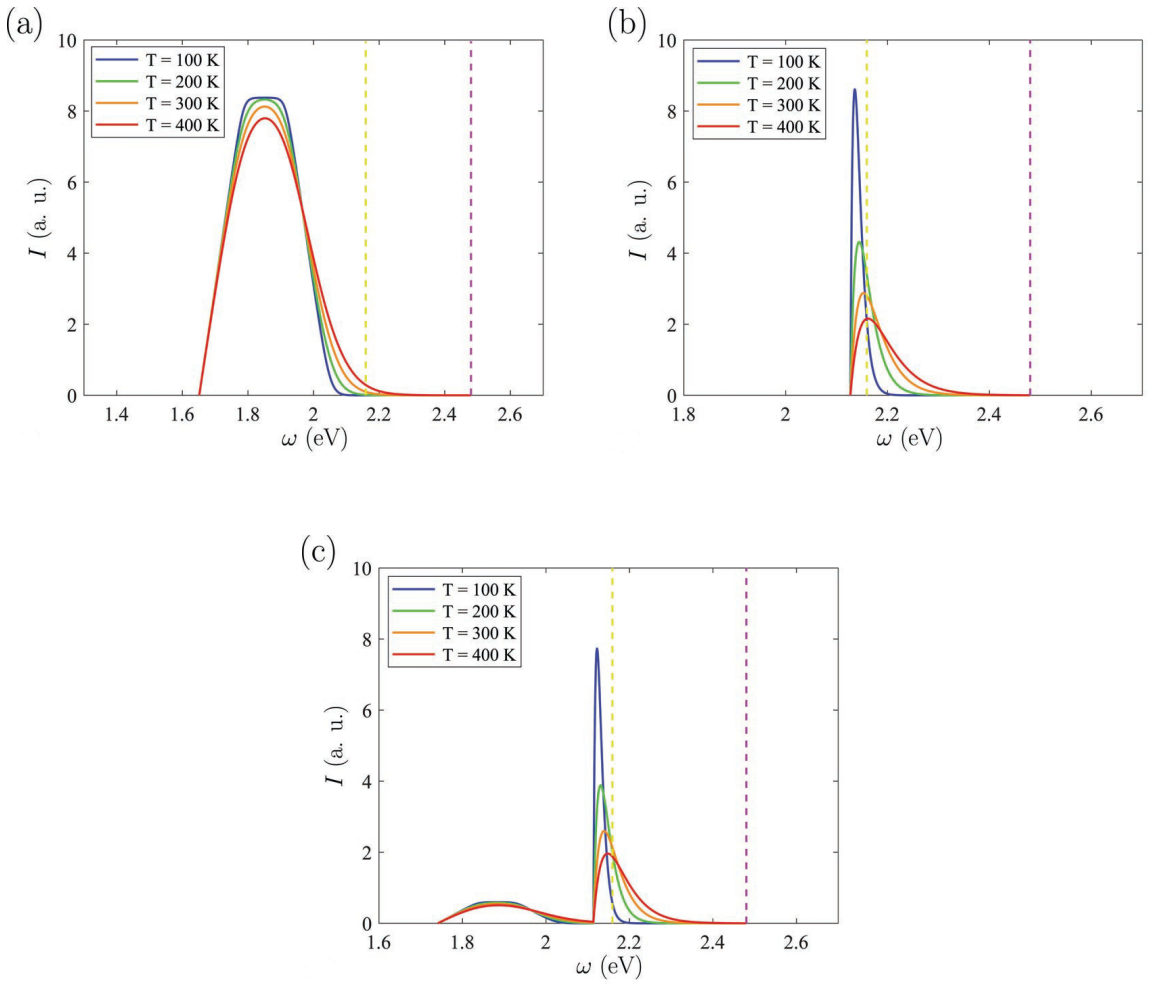

Рис. 5. (В цвете онлайн) Расчет линий рекомбинации ЭДЖ в спектре фотолюминесценции монослоя MoS_2 для четырех значений температуры. Желтыми и фиолетовыми пунктирными линиями отмечены соответственно положения линии экситона и края непрерывного спектра. Энергия связи экситона вычислена вариационно и равна 321 мэВ. Эффективные массы носителей заряда ($m_e^* = 0.55m_0$, $m_h^* = 0.56m_0$, m_0 — масса свободного электрона) и значение зонной щели ($E_g^{(0)} = 2.48$ эВ) взяты из работы [41]. *a* — Профиль линии рекомбинации металлической ЭДЖ для $P_e = 0$. *b* — Профиль линии рекомбинации диэлектрической ЭДЖ для $P_e = 1$. *c* — Результирующий профиль в случае сосуществования обоих типов ЭДЖ для $P_e = 0.5$. Доля электрон-дырочных пар в металлической фазе принята равной 0.2 от общего числа пар (она зависит от интенсивности фотовозбуждения — насколько сильнее накачка по сравнению с оптимальной, когда имеется точное совпадение плотности фотовозбужденных носителей заряда с равновесной плотностью диэлектрической ЭДЖ)

разница между заселенностями долин достаточно велика, более энергетически выгодной становится диэлектрическая ЭДЖ. Это происходит при превышении порогового значения степени циркулярной поляризации возбуждающего света. Нами также вкратце описаны возможные способы экспериментального наблюдения перехода металлическая ЭДЖ–диэлектрическая ЭДЖ.

Благодарности. Автор очень благодарен своему учителю А. П. Силину за вдохновение на эту работу. Автор выражает С. Г. Тиходееву глубокую признательность за плодотворные дискуссии. Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант № 20-1-3-68-1).

Приложение А

Оператор $\widehat{\mathcal{H}}_0$ содержит члены, билинейные по фермиевским операторам (в отличие от работы [9] здесь учтено, что $m_e \neq m_h$, и учтена специфика зонной структуры монослоев ДПМ):

$$\widehat{\mathcal{H}}_0 = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{p}s\tau}\left\{\left[\cos 2\varphi_{\mathbf{p}}\left(\frac{1}{2}\xi_{\mathbf{p}} - \mathcal{V}_{\mathbf{p}}\right) + \sin 2\varphi_{\mathbf{p}}\widetilde{\mathcal{V}}_{\mathbf{p}}\right]\left(a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a_{\mathbf{p}sK_\tau} + b^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}b_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}\right) - \right.$$
$$- \left[\xi_{\mathbf{p}}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}} + \cos 2\varphi_{\mathbf{p}}\mathcal{V}_{\mathbf{p}} - \sin 2\varphi_{\mathbf{p}}\widetilde{\mathcal{V}}_{\mathbf{p}}\right]a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a_{\mathbf{p}sK_{-\tau}} + \frac{1}{2}\delta\xi_{\mathbf{p}}\left(a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a_{\mathbf{p}sK_\tau} - b^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}b_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}\right) +$$
$$\left. + \xi^{e}_{\mathbf{p}}a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a_{\mathbf{p}sK_\tau}\right\} + \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{\mathbf{p}s\tau}\left[\sin 2\varphi_{\mathbf{p}}\left(\frac{1}{2}\xi_{\mathbf{p}} - \mathcal{V}_{\mathbf{p}}\right) - \cos 2\varphi_{\mathbf{p}}\widetilde{\mathcal{V}}_{\mathbf{p}}\right]\left(a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} + b_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}a_{\mathbf{p}sK_\tau}\right),$$

где введены обозначения $\xi_{\mathbf{p}} = \varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu$, $\xi^{e,h}_{\mathbf{p}} = \varepsilon^{e,h}_{\mathbf{p}} - \mu_{e,h}$ ($\xi_{\mathbf{p}} \equiv \xi^{e}_{\mathbf{p}} + \xi^{h}_{\mathbf{p}}$), $\delta\xi_{\mathbf{p}} = \xi^{e}_{\mathbf{p}} - \xi^{h}_{\mathbf{p}}$,

$$\mathcal{V}_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}'}V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}'} \quad \text{и} \quad \widetilde{\mathcal{V}}_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}'}V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}\cos\varphi_{\mathbf{p}'}\sin\varphi_{\mathbf{p}'}.$$

Оператор $\widehat{\mathcal{H}}_i$ содержит четверные комбинации ферми-операторов:

$$\widehat{\mathcal{H}}_i = \frac{1}{4}\sum_{\substack{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{k}\\ ss'\tau\tau'}}V_{\mathbf{k}}\left\{\frac{1}{2}\left(\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}+1\right)\left(\gamma_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}+1\right)a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_\tau} + \right.$$
$$+ \frac{1}{2}\left(\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}-1\right)\left(\gamma_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}+1\right)a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_{-\tau}} +$$
$$+ \frac{1}{2}\left(\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}+1\right)\left(\gamma_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}-1\right)a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}s'K_{-\tau'}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_\tau} +$$
$$+ \frac{1}{2}\left(\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}-1\right)\left(\gamma_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}-1\right)a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}s'K_{-\tau'}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_{-\tau}} +$$
$$+ \frac{1}{2}\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}b^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}b^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\mathrm{sgn}(s')}}b_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}s'K_{\mathrm{sgn}(s')}}b_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_{\mathrm{sgn}(s)}} -$$
$$- \left(\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}+1\right)\gamma_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}b^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\mathrm{sgn}(s')}}b_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}s'K_{\mathrm{sgn}(s')}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_\tau} -$$
$$- \left(\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}-1\right)\gamma_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}b^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\mathrm{sgn}(s')}}b_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}s'K_{\mathrm{sgn}(s')}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_{-\tau}} +$$
$$+ \sqrt{2}\left(\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}+1\right)\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}\left[a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}'-\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_\tau} + \text{H.c.}\right] +$$
$$+ \sqrt{2}\left(\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}-1\right)\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}\left[a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}'-\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_{-\tau}} + \text{H.c.}\right] -$$
$$- \sqrt{2}\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}\left[a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}'-\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}b^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_{\mathrm{sgn}(s)}}b_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_{\mathrm{sgn}(s)}} + \text{H.c.}\right] +$$
$$+ \widetilde{\gamma}_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}\left[a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}'-\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}+\mathbf{k}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} + \right.$$
$$\left.\left. + a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}+\mathbf{k}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}b_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}a_{-\mathbf{p}'s'K_{\tau'}} + \text{H.c.}\right]\right\}.$$

Здесь, как и в работе [9], введены функции

$$\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}'} = \cos\left(\varphi_{\mathbf{p}} - \varphi_{\mathbf{p}'}\right) \quad \text{и} \quad \widetilde{\gamma}_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}'} = \sin\left(\varphi_{\mathbf{p}'} - \varphi_{\mathbf{p}}\right).$$

Учитывая, что $\sin\varphi_{\mathbf{p}} \sim \sqrt{n}$ и $\cos\varphi_{\mathbf{p}} \sim 1 - \mathcal{O}(n)$ (согласно условию (16)), находим $\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}'} \sim 1 - \mathcal{O}(n)$ и $\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}'} \sim \sqrt{n}$ [9]. Отсюда получаем, что члены, ответственные за «переброс» электрона из одной долины в другую, подавлены как $\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}} - 1 \sim n$, а члены с двойным междолинным «перебросом» электрона подавлены как $\left(\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k}}-1\right)\left(\gamma_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k}}-1\right) \sim n^2$.

Приложение Б

Матрица поворота в (20) равна

$$M_{\mathrm{sgn}(s)} \equiv M_{\pm}\left(\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)},\, \phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\right) =$$
$$= \begin{pmatrix} \cos^2\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} + \sin^2\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\cos\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} & \cos\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\sin\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\left(\cos\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} - 1\right) & \sin\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\sin\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} \\ \cos\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\sin\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\left(\cos\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} - 1\right) & \sin^2\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} + \sin^2\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\cos\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} & \cos\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\sin\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} \\ -\sin\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\sin\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} & -\cos\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\sin\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} & \cos\varphi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} \end{pmatrix}.$$

Здесь, как и в основном тексте статьи, $\pm$ совпадает с $\mathrm{sgn}(s)$.

Приложение В

Оператор $\widehat{\mathcal{H}}_0$ в выражении (24) есть

$$\widehat{\mathcal{H}}_0 = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{p}s\tau}\left\{\left(1-\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\left(\frac{1}{2}\xi_{\mathbf{p}} - \mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(1)}\right)\cos^2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} - \sqrt{1-\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}}\left(\sqrt{1-\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}}\times\right.\right.$$
$$\left.\times\frac{1}{2}\xi_{\mathbf{p}} - \mathcal{V}_{\mathbf{p}s\tau}\right)\sin^2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} - \left(1+\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(2)} + \tau\sin 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\cos\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(3)} +$$
$$+\left(1-\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\sin 2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(4)} - 4\tau\sin 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\sin\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(5)} + \frac{1}{2}\left(1-\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\delta\xi_{\mathbf{p}} +$$
$$\left.+\left(1+\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\xi^{e}\right\}a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a_{\mathbf{p}sK_\tau} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{p}s\tau}\left\{-\sin 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\left[\xi_{\mathbf{p}}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} + \cos^2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(1)} - \right.\right.$$
$$\left.-\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(2)} - \sin 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(4)}\right] + \sqrt{1-\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s-\tau} + \cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\left(\cos\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(3)} - \right.$$
$$\left.\left.-4\sin\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(5)}\right)\right\}a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a_{\mathbf{p}sK_{-\tau}} + \sum_{\mathbf{p}s}\left\{\frac{1}{2}\xi_{\mathbf{p}} - \mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(1)} - \cos^2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(2)} + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sin\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\widetilde{\mathcal{V}}_{\mathbf{p}s+} + \right.\right.$$
$$\left.\left.+\cos\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\widetilde{\mathcal{V}}_{\mathbf{p}s-}\right)\sin 2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} - \frac{1}{2}\delta\xi_{\mathbf{p}}\right\}b^{\dagger}_{\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}b_{\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} + \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{\mathbf{p}s\tau}\left[\sqrt{1-\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}}\times\right.$$
$$\times\left(\frac{1}{2}\xi_{\mathbf{p}} - \mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(1)} - \frac{1}{2}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(2)}\right)\sin 2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} + \frac{1}{2}\tau\sqrt{1+\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}}\sin\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(3)} - \sqrt{1-\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}}\times$$
$$\left.\times\cos 2\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(4)} + \tau\sqrt{1+\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}}\cos\varphi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(5)}\right]\left(a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} + b_{-\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}a_{\mathbf{p}sK_\tau}\right),$$

где введены функции

$$\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(1)} = \sum_{\mathbf{p}'}V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}\cos^2\left(\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} - \phi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\sin^2\varphi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))},$$
$$\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(2)} = \sum_{\mathbf{p}'}V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}\sin^2\left(\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} - \phi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\sin^2\varphi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))},$$
$$\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(3)} = \sum_{\mathbf{p}'}V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}\sin 2\left(\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} - \phi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\sin^2\varphi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))},$$
$$\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(4)} = \sum_{\mathbf{p}'}V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}\cos\left(\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} - \phi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\cos\varphi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))}\sin\varphi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))},$$
$$\mathcal{V}_{\mathbf{p}s}^{(5)} = \sum_{\mathbf{p}'}V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}\sin\left(\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))} - \phi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))}\right)\cos\varphi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))}\sin\varphi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))},$$
$$\mathcal{V}_{\mathbf{p}s\tau} = \sum_{\mathbf{p}'}V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}\sqrt{1-\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}}\sin^2\varphi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))},$$
$$\widetilde{\mathcal{V}}_{\mathbf{p}s\tau} = \sum_{\mathbf{p}'}V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}\sqrt{1-\tau\cos 2\phi_{\mathbf{p}}^{(\mathrm{sgn}(s))}}\cos\varphi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))}\sin\varphi_{\mathbf{p}'}^{(\mathrm{sgn}(s))}.$$

Оператор $\widehat{\mathcal{H}}_i$ в выражении (24) есть

$$\widehat{\mathcal{H}}_i = \frac{1}{4}\sum_{\substack{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{k}\\ ss'\tau\tau'}} V_{\mathbf{k}} \Big\{ \frac{1}{2}\mathcal{F}^{(+)}_{s\tau}(\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k})\,\mathcal{F}^{(+)}_{s'\tau'}(\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k})\,a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_\tau} +$$
$$+\frac{1}{2}\mathcal{F}^{(+)}_{s\tau}(\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k})\,\mathcal{F}^{(-)}_{s'\tau'}(\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k})\,a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}s'K_{-\tau'}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_\tau} +$$
$$+\frac{1}{2}\mathcal{F}^{(-)}_{s\tau}(\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k})\,\mathcal{F}^{(+)}_{s'\tau'}(\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k})\,a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_{-\tau}} +$$
$$+\frac{1}{2}\mathcal{F}^{(-)}_{s\tau}(\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k})\,\mathcal{F}^{(-)}_{s'\tau'}(\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k})\,a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}s'K_{-\tau'}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_{-\tau}} +$$
$$+\frac{1}{2}\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k},\,s}\gamma_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k},\,s}b^{\dagger}_{\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}b^{\dagger}_{\mathbf{p}'-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}b_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}b_{\mathbf{p}-\mathbf{k}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} -$$
$$-\mathcal{F}^{(+)}_{s\tau}(\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k})\,\gamma_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k},\,s'}a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}b^{\dagger}_{\mathbf{p}'-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}b_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_\tau} -$$
$$-\mathcal{F}^{(-)}_{s\tau}(\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k})\,\gamma_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k},\,s'}a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}b^{\dagger}_{\mathbf{p}'-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}b_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_{-\tau}} +$$
$$+\sqrt{2}\mathcal{F}^{(+)}_{s\tau}(\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k})\,\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k},\,s',\,\tau'}\Big[a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}'-\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_\tau} + \mathrm{H.c.}\Big] +$$
$$+\sqrt{2}\mathcal{F}^{(-)}_{s\tau}(\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k})\,\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k},\,s',\,\tau'}\Big[a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}'-\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}sK_{-\tau}} + \mathrm{H.c.}\Big] -$$
$$-\sqrt{2}\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k},\,s}\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k},\,s',\,\tau'}\Big[a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}'-\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}b^{\dagger}_{\mathbf{p}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}b_{\mathbf{p}-\mathbf{k}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} + \mathrm{H.c.}\Big] +$$
$$+\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}-\mathbf{k},\,s,\,\tau}\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p}',\,\mathbf{p}'+\mathbf{k},\,s',\,\tau'}\Big[a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{p}'s'K_{\tau'}}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}'-\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}+\mathbf{k}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}} +$$
$$+a^{\dagger}_{\mathbf{p}sK_\tau}b^{\dagger}_{-\mathbf{p}+\mathbf{k}-sK_{-\mathrm{sgn}(s)}}b_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}-s'K_{-\mathrm{sgn}(s')}}a_{-\mathbf{p}'s'K_{\tau'}} + \mathrm{H.c.}\Big]\Big\},$$

где введены функции

$$\mathcal{F}^{(\pm)}_{s\tau}(\mathbf{p},\,\mathbf{p}') = \sqrt{1-\tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}}\sqrt{1\mp\tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}}\,\gamma'_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}',\,s}\pm$$
$$\pm\sqrt{1+\tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}}\sqrt{1\pm\tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}}\cos\left(\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}-\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}\right)\pm$$
$$\pm\tau\sin\left(\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}-\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}\right)\left[\sqrt{1-\tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}}\sqrt{1\pm\tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}}\cos\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}\mp\right.$$
$$\left.\mp\sqrt{1+\tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}}\sqrt{1\mp\tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}}\cos\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}\right],$$

$$\gamma_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}',\,s} = \cos\left(\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}-\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}\right)\sin\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}\sin\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}+\cos\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}\cos\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'},$$
$$\gamma'_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}',\,s} = \sin\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}\sin\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}+\cos\left(\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}-\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}\right)\cos\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}\cos\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'},$$
$$\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}',\,s,\,\tau} = \sqrt{1-\tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}}\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}',\,s}-\tau\sqrt{1+\tau\cos 2\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}}\sin\left(\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}-\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}\right)\sin\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'},$$
$$\widetilde{\gamma}_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}',\,s} = \cos\left(\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}-\phi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}\right)\cos\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}\sin\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}-\sin\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}}\cos\varphi^{(\mathrm{sgn}(s))}_{\mathbf{p}'}.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. П. В. Ратников, А. П. Силин, УФН **188**, 1249 (2018).

2. B. Urbaszek and X. Marie, Nature Phys. **11**, 94 (2015).

3. М. В. Дурнев, М. М. Глазов, УФН **188**, 913 (2018).

4. Л. В. Келдыш, *Коллективные свойства экситонов в полупроводниках*, в кн. *Экситоны в полупроводниках*, Наука, Москва (1971), с. 5.

5. P. Vashishta, P. Bhattacharyya, and K. S. Singwi, Nuovo Cim. **23B**, 172 (1974).

6. Л. В. Келдыш, Ю. В. Копаев, ФТТ **6**, 2791 (1964).

7. W. F. Brinkman and T. M. Rice, Phys. Rev. B **7**, 1508 (1973).

8. Л. В. Келдыш, А. П. Силин, КСФ №8, 33 (1975).

9. Л. В. Келдыш, А. Н. Козлов, ЖЭТФ **54**, 978 (1968).

10. Н. С. Рытова, Вестн. Моск. ун-та, сер. 3, Физ. Астрон. №3, 30 (1967).

11. Л. В. Келдыш, Письма в ЖЭТФ **29**, 716 (1979).

12. П. Л. Пех, П. В. Ратников, А. П. Силин, Письма в ЖЭТФ **111**, 80 (2020).

13. П. Л. Пех, П. В. Ратников, А. П. Силин, ЖЭТФ **160**, 572 (2021).

14. C. M. Gilardoni et al., Phys. Rev. B **103**, 115410 (2021).

15. G. Wang, C. Robert, A. Suslu et al., Nature Comm. **6**, 10110 (2015).

16. K. Kośmider, J. W. González, and J. Fernández-Rossier, Phys. Rev. B **88**, 245436 (2013).

17. A. Kormányos, V. Zólyomi, N. D. Drummond, and G. Burkard, Phys. Rev. X **4**, 011034 (2014).

18. А. Н. Лобаев, А. П. Силин, ФТТ **26**, 2910 (1984).

19. Z. Li, T. Wang, Z. Lu et al., Nature Comm. **9**, 3719 (2018).

20. M. Goryca, J. Li, A. V. Stier et al., Nature Comm. **10**, 4172 (2019).

21. K. F. Mak, K. He, C. Lee et al., Nature Mater. **12**, 207 (2013).

22. J. S. Ross, S. Wu, H. Yu et al., Nature Comm. **4**, 1474 (2013).

23. J. Yang, T. Lü, Y. W. Myint et al., ACS Nano **9**, 6603 (2015).

24. А. Н. Лобаев, А. П. Силин, Труды ФИАН **188**, 53 (1988).

25. A. P. Silin and P. V. Ratnikov, Phys. Rev. B **109**, 195157 (2024).

26. С. Г. Тиходеев, УФН **145**, 3 (1985).

27. C. Robert, D. Lagarde, F. Cadiz et al., Phys. Rev. B **93**, 205423 (2016).

28. G. Moody, J. Schaibley, and X. Xu, J. Opt. Soc. Am. B **33**, C39 (2016).

29. F. Ceballos, Q. Cui, M. Z. Bellusa, and H. Zhao, Nanoscale **8**, 11681 (2016).

30. T. Eknapakul, P. D. C. King, M. Asakawa et al., Nano Lett. **14**, 1312 (2014).

31. K. He, N. Kumar, L. Zhao et al., Phys. Rev. Lett. **113**, 026803 (2014).

32. A. F. Rigosi, H. M. Hill, K. T. Rim et al., Phys. Rev. B **94**, 075440 (2016).

33. M. Combescot and P. Nozières, J. Phys. C **5**, 2369 (1972).

34. Е. А. Андрюшин, Л. В. Келдыш, А. П. Силин, ЖЭТФ **73**, 1163 (1977).

35. P. V. Ratnikov, Phys. Lett. A **444**, 128235 (2022).

36. Н. В. Валенко, О. А. Дмитриева, С. Г. Тиходеев, Компьютерная оптика **48** (принята к публикации).

37. Т. Райс, Дж. Хенсел, Т. Филлипс, Г. Томас, *Электронно-дырочная жидкость в полупроводниках*, Мир, Москва (1980).

38. *Электронно-дырочные капли в полупроводниках*, под ред. К. Д. Джеффрис, Л. В. Келдыша, Наука, Москва (1988).

39. Н. Н. Сибельдин, ЖЭТФ **149**, 678 (2016).

40. Н. Н. Сибельдин, УФН **187**, 1236 (2017).

41. F. A. Rasmussen and K. S. Thygesen, J. Phys. Chem. C **119**, 13169 (2015).

42. Y. Yu, A. W. Bataller, R. Younts et al., ACS Nano **13**, 10351 (2019).

43. T. B. Arp, D. Pleskot, V. Aji, and N. M. Gabor, Nature Photon. **13**, 245 (2019).

44. Y. Yu, G. Li, Y. Xu et al., ACS Nano **17**, 15474 (2023).

45. P. Dey, T. Dixit, V. Mishra et al., Adv. Opt. Mater. 11, 2202567 (2023).