
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»
Физтех-школа физики и исследований им. Ландау
Кафедра проблем теоретической физики (теоргруппа Горькова)

Направление подготовки / специальность: 03.04.01 Прикладные математика и физика

Направленность (профиль) подготовки: Общая и прикладная физика

**ТЕОРИЯ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ ФЕРМИ-ПОЛЯРОННЫМИ
СОСТОЯНИЯМИ В ДВУМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПОД
ДЕЙСТВИЕМ ИЗЛУЧЕНИЯ**

(магистерская диссертация)

Студент:

Шенцев Александр Михайлович

(подпись студента)

Научный руководитель:

Глазов Михаил Михайлович,
д-р физ.-мат. наук, чл.-кор. РАН

(подпись научного руководителя)

Консультант (при наличии):

(подпись консультанта)

Москва 2026

Аннотация

В данной работе теоретически исследованы переходы между экситоном (электрон-дырочной парой) и трионом (связанным состоянием экситона и электрона) под действием мощных пикосекундных терагерцовых импульсов. Мы развиваем многочастичный подход, рассматривая трионное и экситонное состояния в рамках ферми-поляронной модели, явно учитывающей корреляции экситона с ферми-морем резидентных носителей заряда. Показано, что прямой переход с поглощением терагерцового фотона имеет порог при энергии связи ферми-полярона $|E_{FP}|$ и характеризуется вблизи порога частотной зависимостью $(\hbar\omega - |E_{FP}|)^{3/2}$, обусловленной электрон-экситонными корреляциями в конечном состоянии. Продемонстрированы размывание многочастичных корреляций вследствие спектрального уширения, а также необходимость учёта диссоциации трионов за счёт столкновений с горячими электронами, энергия которых вследствие сопутствующего разогрева достигает величины, сравнимой с энергией связи ферми-полярона. Кроме того, изучена нелинейная динамика системы (электроны – экситоны – трионы), приводящая к бистабильности стационарной температуры и других наблюдаемых величин в зависимости от мощности разогрева внешним электромагнитным полем.

Содержание

1	Введение	3
2	Постановка задачи	6
2.1	Двухчастичное описание прямого процесса	7
2.2	Модель учета корреляций	8
3	Темп прямого процесса	11
3.1	Влияние корреляций	11
3.2	Учёт уширения спектральных линий	13
4	Разогрев электронного газа	15
4.1	Матричный элемент рассеяния	15
4.2	Рассеяние на точечных дефектах	15
4.3	Рассеяние на фононах	16
4.4	Температура электронного газа	17
5	Процесс ударной диссоциации	21
6	Бистабильность разогрева	25
6.1	Динамические уравнения	25
6.2	Разогрев и охлаждение системы	28
6.3	Бистабильность системы	29
6.4	Время переключения	31
7	Заключение	34
A	Дополнительные материалы к разделу «Бистабильность разогрева»	40
A.1	Режим низкой электронной плотности	40
A.2	Время перемешивания температуры	41
A.3	Влияние нерезонансной фотогенерации	41
A.4	Роль экситон-экситонных и трион-трионных столкновений	42

1 Введение

Последние десятилетия физика двумерных материалов вызывает широкий интерес [1] как с точки зрения теоретических и экспериментальных исследований, так и приложений в различных наукоёмких устройствах. Важной точкой развития этой отрасли стали работы А. Гейма и К. Новосёлова, в которых были получены и исследованы как монослои графита (графен) [2], так и ряд других двумерных кристаллов [3]. Ими была показана возможность микромеханического расщепления — «отшелушивания» ван-дер-ваальсовых материалов, в которых связь между слоями осуществляется за счёт сил ван-дер-ваальса и является на несколько порядков слабее, чем ковалентная связь внутри слоёв. Данный метод оказался дешёвым и достаточно простым, что дало существенный толчок исследованию целого ряда атомарно-тонких структур.

Среди двумерных ван-дер-ваальсовых материалов отдельного упоминания заслуживают монослои дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ), в первую очередь MoS_2 , MoSe_2 , WS_2 , WSe_2 , которые являются прямозонными полупроводниками с шириной запрещённой зоны ~ 2 эВ [4, 5]. Слабая экранировка в тонких плёнках [6] и относительно большие эффективные массы электрона и дырки приводят к тому, что в оптическом спектре данного ряда материалов ярко проявляются различные кулоновские комплексы с большими энергиями связи [7–9]. В частности, как нейтральный экситон X — связанное за счёт кулоновского взаимодействия состояние электрона в зоне проводимости и дырки в валентной зоне, а также заряженные экситоны — трионы, когда к нейтральному экситону присоединяется электрон из зоны проводимости (X^- - трион) или дырка из валентной зоны (X^+ - трион). Энергия связи экситона составляет десятые доли эВ, в то время как энергия связи триона на порядок меньше $\sim 20\text{--}30$ мэВ [10, 11] и находится в терагерцовом (ТГц) диапазоне излучения, который в настоящее время вызывает особый интерес с точки зрения фундаментальных исследований и потенциальных применений [12–16].

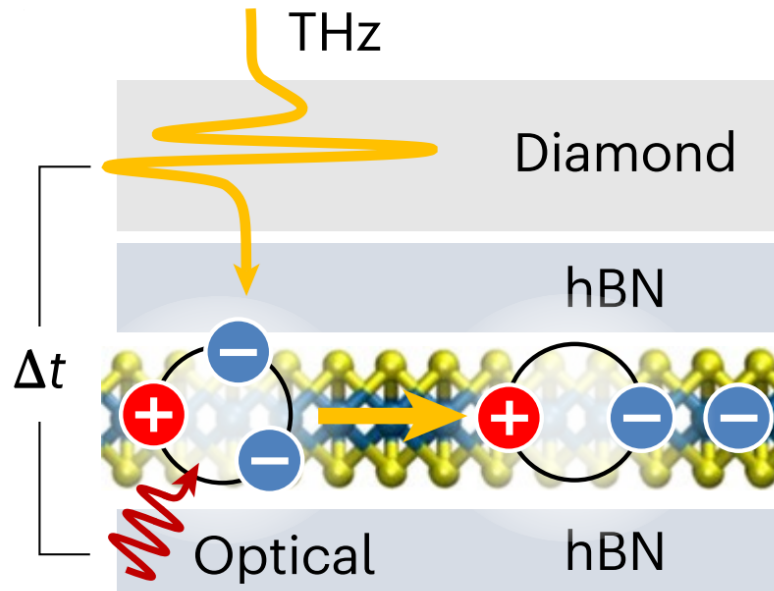


Рис. 1: Схематическая иллюстрация эксперимента [17]: оптической накачкой создаются X^- -трионы в n -легированном MoSe_2 , инкапсулированном в hBN на алмазной подложке; через время Δt посылается пикосекундный терагерцовый импульс, в результате которого образовавшиеся трионы диссоциируют.

В недавней экспериментальной работе [17] была продемонстрирована эффективность конверсии трионов в экситоны под действием ТГц излучения. Для этого использовалась следующая экспериментальная схема (см. рис. 1): монослой MoSe_2 n-типа, инкапсулированный в гексагональный нитрид бора (hBN), вначале подвергался импульсной оптической накачке с энергией кванта, большей, чем ширина запрещённой зоны E_g для образования экситонов и трионов, после этого с управляемой временной задержкой ($\Delta t \sim 10$ пикосекунд) посылался короткий пикосекундный ТГц импульс при помощи лазера на свободных электронах. Как видно на левой панели рис. 2, без подачи терагерцового импульса из-за энергетической релаксации экситонов и их связывания с резидентными носителями заряда в трионы через несколько десятков пикосекунд после оптической накачки в фотолюминесценции почти отсутствует экситонный пик. В свою очередь, воздействие ТГц излучением приводит к диссоциации трионов за счёт поглощения ТГц фотонов (см. рис. 1), тем самым существенно усиливая экситонную фотолюминесценцию с одновременным ослаблением трионного пика (см. правую панель рис. 2), что позволяет говорить об эффективной конверсии между этими двумя состояниями.

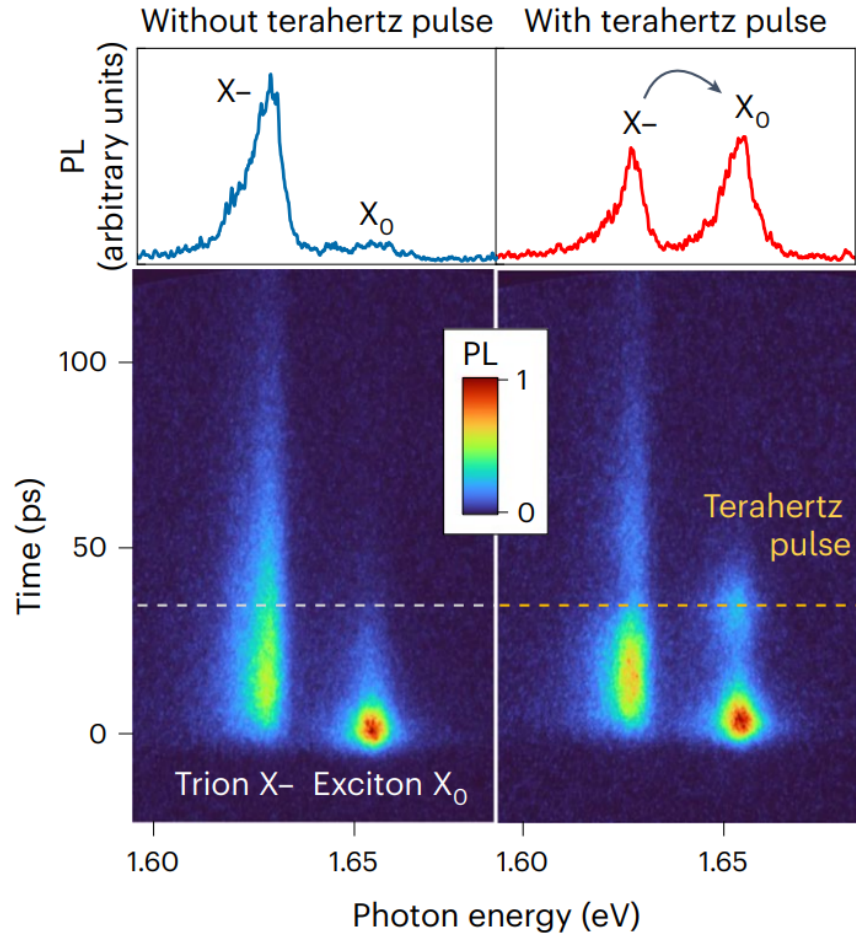


Рис. 2: Фотолюминесценция монослоя MoSe_2 , измеренная в эксперименте [17]. В левой части изображена фотолюминесценция без ТГц импульса – виден яркий трионный пик, экситонный пик почти отсутствует. При подаче ТГц импульса (правая часть изображения) экситонный пик существенно увеличивается с одновременным ослаблением трионного пика.

Хотя упрощённый подход, описывающий переход между экситонным и трионным состояниями, даёт разумное согласие с экспериментальными результатами, важно рассмотреть роль многочастичных эффектов, возникающих за счёт корреляций экситонов и трионов с морем Ферми резидентных носителей заряда. Действительно, при конечной плотности носителей заряда экситон может связываться с любым из них. Корректное описание этого требует применения многочастичного подхода. С точки зрения многочастичной теории, оптические и транспортные проявления трионов могут быть описаны в рамках подхода Ферми-полярона/тетрона Суриса [10, 18–21], где явно учитываются корреляции между экситоном и морем Ферми. Несмотря на то что во многих случаях трионная и поляронная картины дают по существу одинаковые результаты [22, 23], тонкая структура энергетического спектра триона и ферми-полярона, связанная с обменным взаимодействием электрона и дырки, оказывается кардинально различной, как было показано теоретически [24, 25] и демонстрировалось экспериментально [26].

Цель данной работы – построить теорию конверсии трионов в экситоны под действием ТГц излучения с учётом многочастичных корреляций, а также изучить сопутствующий ТГц импульсу нагрев электронного газа и рассмотреть вклад в конверсию, возникающий в результате ударной диссоциации трионов за счёт столкновения с горячими электронами, энергия которых порядка энергии связи триона. Здесь мы также исследуем нелинейное поведение рассматриваемой нами системы кулоновских комплексов, а именно бистабильность температуры от интенсивности внешнего поля. Основные результаты работы опубликованы в статье [27] и препринте [28].

2 Постановка задачи

Трион X^- представляет собой связанное состояние экситона и электрона из зоны проводимости или дырки из валентной зоны. Несмотря на нейтральность экситона, образование подобного трёхчастичного комплекса возможно в результате обменного взаимодействия. Энергия связи экситона E_X в монослоях дихалькогенидов переходных металлов на порядок больше энергии связи триона E_T , поэтому экситон можно рассматривать в качестве бесструктурной твёрдой частицы, а результат обменного взаимодействия моделировать как короткодействующие притягивающие взаимодействия между экситоном и резидентными носителями заряда, как это было предложено Р. А. Сурисом [29].

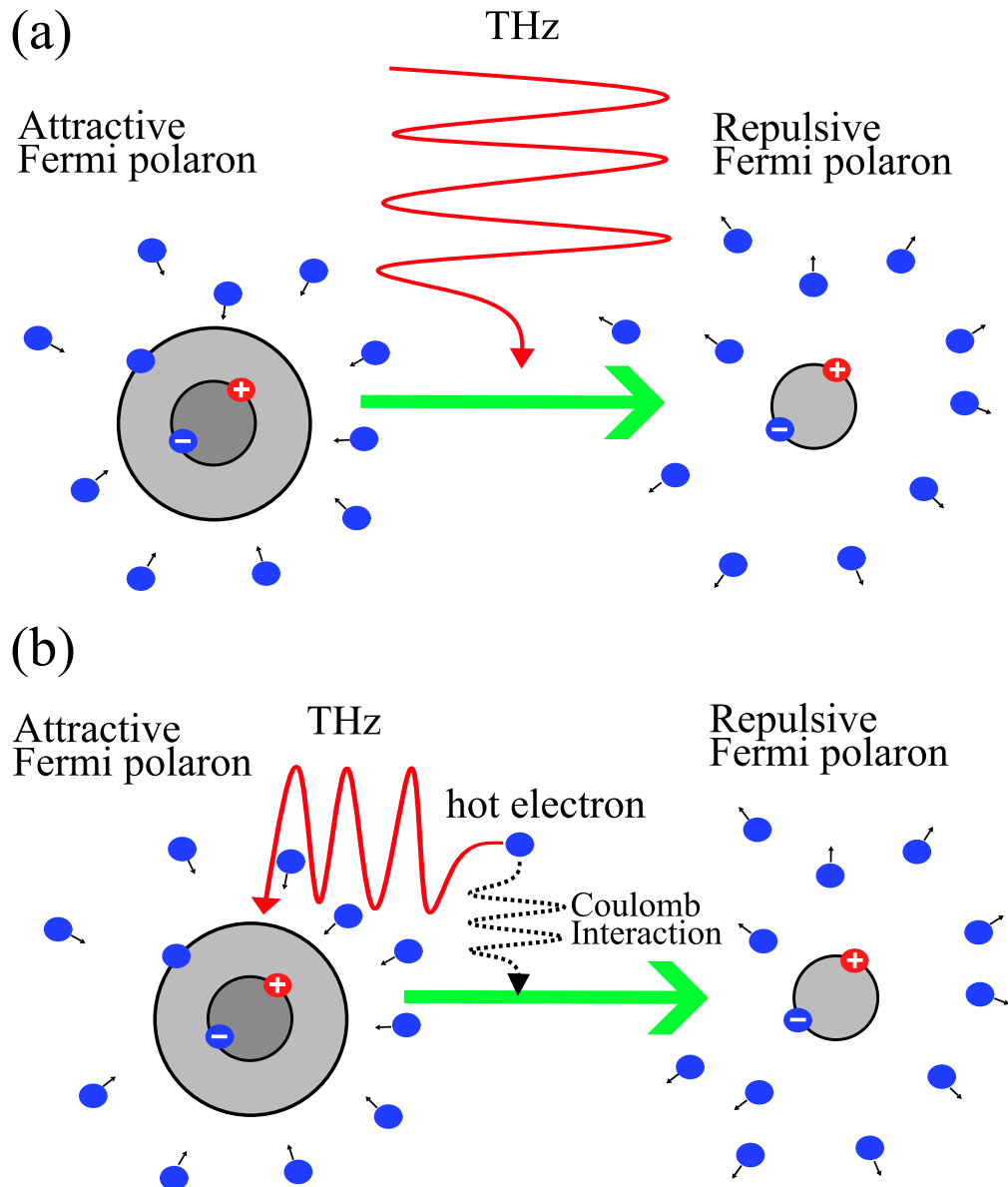


Рис. 3: Схема изучаемых процессов. (а) Переход между притягивающим (трионоподобным) и отталкивающим (экситоноподобным) Ферми-поляронами вследствие прямого поглощения ТГц-излучения. (б) Распад притягивающего Ферми-полярона вследствие взаимодействия с «горячим» электроном.

При воздействии терагерцового излучения конверсия трионов в экситоны может проходить по двум следующим механизмам. Первый из них – прямой процесс конверсии, качественно соответствующий поглощению терагерцового кванта с «отрывом» электрона от триона и переходу системы в состояние экситон+свободный электрон, см. рис. 4(а). Второй механизм – косвенный, он обусловлен разогревом электронного газа за счёт терагерцового импульса, что приводит к появлению горячих электронов с кинетическими энергиями порядка E_T и, соответственно, к диссоциации трионов за счёт столкновений, см. рис. 4(б). Как было сказано ранее, на самом деле картина трионов и экситонов более сложная и в некоторых случаях требует многочастичного описания с учётом корреляций с резидентными носителями заряда. В этом случае принято называть трион – притягивающим Ферми-поляроном (тетрон Суриса), а экситон – отталкивающим Ферми-поляроном, см. рис. 4. При этом энергия связи Ферми-полярона $|E^{FP}|$ (мы будем считать $E^{FP} < 0$) отличается от энергии связи триона на величину порядка энергии Ферми $|E^{FP} - E_T| \sim E_F$ [24]. Ввиду того, что рассматриваемые здесь плотности электронов малы (в теории считается, что $E_F \ll E_T$), энергия связи Ферми-полярона не сильно отличается от затравочной энергии связи триона, оставаясь в терагерцовом диапазоне. Помимо этого, так как концентрация резидентных зарядов мала, как будет показано многие результаты многочастичного подхода не отличаются от результатов подхода без учёта корреляций. Поэтому полезно иметь в виду и простое, показательное двухчастичное (экситон + электрон) описание прямого процесса перехода.

2.1 Двухчастичное описание прямого процесса

В двухчастичном подходе связанное состояние и состояния непрерывного спектра даются решением стационарного уравнения Шрёдингера для относительного движения электрона и экситона:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{2D} + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\rho) = E \psi(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Здесь Δ_{2D} – двумерный оператор Лапласа, $\mu = M_e M_X / M_T$ – приведённая масса, M_e – масса электрона, M_X – масса экситона, $M_T = M_e + M_X$ – масса триона, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_X$ – радиус-вектор между электроном и экситоном, E – энергия относительного движения, $V(\mathbf{r}) = V(r)$ – короткодействующее взаимодействие, отличное от нуля при $r < a_X$, где a_X – характерный размер экситона (боровский радиус). В приближении экситона в качестве бесструктурной частицы размер экситона a_X является параметром регуляризации для дельта-функционального взаимодействия $V(\mathbf{r}) = V\delta(\mathbf{r})$. Так как энергия относительного движения для связанного состояния – это энергия связи триона E_T , то волновая функция для связанного состояния $\psi_b(r)$ имеет вид:

$$\psi_b(r) = \frac{\kappa}{\sqrt{\pi}} K_0(\kappa r), \quad (2)$$

где $\kappa^2 = 2\mu E_T / \hbar^2$, $K_0(\kappa r)$ – функция Макдональда. Также при нахождении нормировки волновой функции вклад от области $r < a_X$ не учитывается ввиду малости a_X . Состояния непрерывного спектра для расходящейся волны при рассеянии в s -канале имеют вид:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{S}} \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{i\mu}{2} F \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right) H_0^{(2)}(kr) \right); \quad F(\varepsilon) = -\frac{2\pi}{\mu \ln \left(\frac{\varepsilon - i\delta}{-E_T} \right)}. \quad (3)$$

Здесь $\sqrt{S}$ – площадь монослоя, $F(\varepsilon)$ – амплитуда рассеяния в s -канале, $H_0^{(2)}(kr)$ – функция Ганкеля второго рода.



Рис. 4: Прямой переход из трионного состояния в экситонное под действием терагерцового электромагнитного поля.

Взаимодействие с классическим однородным электромагнитным полем с частотой ω происходит за счёт внешнего электрона в трионе:

$$\hat{H}_{l-e} = -\frac{e}{cM_e} \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(t); \quad \mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_\omega e^{i\omega t} + h.c., \quad (4)$$

что позволяет вывести следующее выражение для матричного элемента прямого перехода из связанного состояния (триона) формула (2) в состояние непрерывного спектра (экситон + свободный электрон) формула (3):

$$M_{\text{dir}}(\mathbf{k}) = -\sqrt{\frac{\kappa^2}{\pi}} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}) \frac{e\hbar}{\sqrt{ScM_e}} \int K_0(\kappa r) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^2r. \quad (5)$$

Видно, что в пренебрежении рассеянием в p -канал выражение для матричного элемента пропорционально образу Фурье волновой функции связанного состояния. Темп прямого процесса вычисляется по золотому правилу Ферми и имеет следующий вид:

$$W_{\text{dir}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} |M_{\text{dir}}(\mathbf{k})|^2 \delta\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} - E_T\right) = I \times \frac{4\alpha\pi^2 \mu \hbar^2 E_T}{M_e^2} \frac{\hbar\omega - E_T}{(\hbar\omega)^4} \theta(\hbar\omega - E_T), \quad (6)$$

где I – интенсивность терагерцового излучения в образце (для простоты мы пренебрегаем диэлектрическим контрастом между образцом и окружающей средой и, как следствие, отражением излучения от образца), $\alpha = 1/137$ – постоянная тонкой структуры. При подобном подходе темп прямого процесса имеет порог при энергии терагерцового кванта, равной энергии связи триона $\hbar\omega = E_T$, при этом W_{dir} вблизи порога линейно зависит от $\hbar\omega - E_T$. Это, как будет показано далее, неверно, так как в области $|\hbar\omega - E_T| \sim E_F$ важны корреляции с морем Ферми резидентных носителей заряда (E_F – энергия Ферми). В то же время корреляции не имеют значения при $|\hbar\omega - E_T| \gg E_F$, и частота, при которой темп прямого процесса максимален, а также его высокочастотная асимптотика определяются образом Фурье основного состояния (??), (5).

2.2 Модель учета корреляций

В соответствии с экспериментальной ситуацией, описанной в работе [17], в данной работе рассматриваются экситоны при наличии фермиевского моря в монослоях ДПМ на основе молибдена. В таких системах актуален только междолинный трион, где экситон в долине K^+ или K^- связан с носителем заряда в противоположной (K^- или K^+) долине. Это связано с принципом Паули, из-за которого внутримолинный трион с двумя электронами с одинаковыми спиновыми компонентами оказывается нестабильным [11]. Таким образом, следуя работам [21, 22, 30], рассматривается следующий простой гамильтониан:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^X b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{p}, \mathbf{p}'} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{p}, \mathbf{k}'+\mathbf{p}'} a_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{k}'}^\dagger b_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}}, \quad (7)$$

который описывает взаимодействие экситонов с электронами из противоположной долины, например экситон в K^+ долине с электронами в K^- долине. Как сказано выше, экситоны рассматриваются как бесструктурные частицы. Здесь $a_{\mathbf{k}}^\dagger, a_{\mathbf{k}}$ — операторы рождения и уничтожения электронов в K^- -долине, при этом $\mathbf{k}$ — волновой вектор, отсчитываемый от K^- точки, $b_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{\mathbf{k}}$ — те же операторы для экситонов в K^+ -долине, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / (2M_e)$ и $\varepsilon_{\mathbf{k}}^X = \hbar^2 k^2 / (2M_X)$ — кинетические энергии электронов и экситонов с их эффективными массами M_e и M_X соответственно. Параметр $V < 0$ описывает притягивающее взаимодействие между экситоном и электроном. Мы предполагаем, что V не зависит от переданного импульса, что соответствует приближению δ -функции для потенциала взаимодействия экситона и электрона в реальном пространстве, см. (1), которое, как известно, является разумным приближением основного вклада, обусловленного обменным взаимодействием, в связь экситона и электрона [30]; см. [31] для более сложных форм взаимодействия экситона и электрона. Взаимодействие экситона в K^- с электронами в K^+ описывается тем же гамильтонианом. Гамильтониан (7) также может быть использован для описания взаимодействия экситонов с находящимися в них дырками в случае p -легированных монослоёв как в структурах на основе вольфрама, так и на основе молибдена. В двумерном случае δ -функциональное взаимодействие приводит к высокоэнергетическим «ультрафиолетовым» расходимостям, что относится и к выписанному выше гамильтониану (7). В данной работе эта расходимость устраняется стандартным способом, а именно путём обрезания интеграла по импульсам при энергиях, соответствующих энергии связи экситона, и выражением результатов через энергию связи триона E_T [22, 30].

Волновая функция Ферми-полярона на самом деле имеет вид четырёхчастичного комплекса (тетрон Суриса). Она является суперпозицией чисто экситонный вклад с вкладами вида: экситон + дополнительная электрон-дырочная пара в зоне проводимости, возбуждаемая за счёт экситон-электронного взаимодействия:

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \varphi_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger |FS\rangle + \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} F_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) b_{\mathbf{k}-\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{q}} |FS\rangle, \quad (8)$$

где $|FS\rangle$ — невозмущённое море Ферми резидентных электронов, $\mathbf{k}$ — квазиволновой вектор полярона, коэффициенты $\varphi_{\mathbf{k}}$ и $F_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ описывают вклады чистого экситона и экситона с возбуждёнными электронно-дырочными парами в многочастичное состояние соответственно. Здесь и далее используется соглашение, введённое в работах [24, 25], где волновые векторы $\mathbf{p}$ соответствуют состояниям выше поверхности Ферми ($p > k_F$, где k_F — волновой вектор Ферми), а $\mathbf{q}$ — состояниям ниже поверхности Ферми ($q < k_F$). Коэффициенты $\varphi_{\mathbf{k}}$, $F_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, а также энергия Ферми-полярона $E_{\mathbf{k}}^{FP}$ находятся из решения уравнения Шрёдингера:

$$\hat{H}_0 |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = E_{\mathbf{k}}^{FP} |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (9)$$

Уравнение (9) имеет два решения: отталкивающий Ферми-полярон и притягивающий Ферми-полярон, которые при $E_F \rightarrow 0$ переходят в случай свободного экситона и триона соответственно.

Состояния сплошного спектра (экситон + пара электрон-дырка в море Ферми) находятся аналогичным образом и имеют вид:

$$|\Phi_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}}\rangle = b_{\mathbf{k}-\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{q}} |FS\rangle + \sum_{\mathbf{p}'} U_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}}(\mathbf{p}') b_{\mathbf{k}-\mathbf{p}'+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{p}'}^\dagger a_{\mathbf{q}} |FS\rangle, \quad (10)$$

где функция $U_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}}(\mathbf{p}')$ учитывает экситон-электронное взаимодействие и аналогично коэффициентам для волновой функции (8) находится из решения уравнения Шрёдингера.

В данном выражении учитывается рассеяние электрона над морем Ферми, но ввиду того, что рассматриваемые температуры и энергия Ферми малы по сравнению с энергией связи триона ($k_B T, E_F \ll E_T$), пренебрегается динамикой дырки в море Ферми.

Как и в двухчастичном подходе 2.1 темп переходов за счет взаимодействия с терагерцовым излучением находится из золотого правила Ферми для возмущения (4)

$$\Upsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \langle \Phi_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}} | \hat{H}_{l-e} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle = - \frac{e\hbar}{cM_e} F_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, \mathbf{q})(\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) - \frac{e\hbar}{cM_e} \sum_{\mathbf{p}'} F(\mathbf{p}', \mathbf{q}) U_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}}^*(\mathbf{p}')(\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}'). \quad (11)$$

Строго говоря, сделанный здесь анзац для волновых функций верен в приближении $\ln(E_T/E_F) \gg 1$, поэтому в дальнейших вычислениях будут удерживаться лишь слагаемые в главном порядке по $1/\ln(E_T/E_F)$.

3 Темп прямого процесса

3.1 Влияние корреляций

Расчет матричного элемента (11) в главном порядке по параметру E_F/E_T приводит к следующим результатам для переходов с нулевым импульсом триона $\mathbf{k} = 0$:

$$\Upsilon_0(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = -\frac{e}{cM_e} \frac{\left[\mathbf{A} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{M_e}{M_T} \mathbf{q} \right) \right]}{2\sqrt{\frac{E_T}{E_F} \left(\frac{M_T}{M_X} \right)^3} \sinh \left[\frac{1}{2} \left(\frac{M_X}{M_T} \right)^2 \right]} \times \frac{2\pi\hbar^3 E_T (E_T + E_{FP} + \varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}}^T - \frac{M_T}{M_X} E_F)^{-1}}{\mu S (E_{FP} - \varepsilon_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}}^X - \varepsilon_{\mathbf{p}} + \varepsilon_{\mathbf{q}})}, \quad (12)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{q}}^T = \hbar^2 q^2 / (2M_T)$ – кинетическая энергия триона. Энергия притягивающего Ферми-полярона $E_{FP} < 0$ в случае монослоёв на основе молибдена была рассчитана в работе [24] и имеет вид:

$$E_{FP} = -E_T + E_F \left(\frac{M_T}{M_X} - \frac{M_X/M_T}{1 - e^{-(M_X/M_T)^2}} \right). \quad (13)$$

Как уже было сказано, абсолютное значение энергии притягивающего Ферми-полярона (тетрона Суриса) отличается от энергии связи триона E_T на величину, пропорциональную энергии Ферми электрона. Скорость прямого перехода, индуцированного ТГц излучением, рассчитывается с помощью уравнения (12) и золотого правила Ферми стандартным образом:

$$W_{\text{dir}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} |\Upsilon_0(\mathbf{p}, \mathbf{q})|^2 \delta(E_{FP} + \hbar\omega - \varepsilon_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}}^X - \varepsilon_{\mathbf{p}} + \varepsilon_{\mathbf{q}}). \quad (14)$$

Результаты численного расчета скорости перехода для различных значений энергии Ферми электрона относительно энергии связи триона показаны на рис. 5. Зависимость W_{dir} от частоты ТГц фотона имеет пороговое значение при $\hbar\omega \approx -E_{FP} \approx E_T$, поскольку при более низких энергиях переходы запрещены в силу законов сохранения. При дальнейшем увеличении частоты ТГц кванта скорость перехода достигает максимума, после чего спадает по тому же степенному закону, что и в случае без учёта корреляций (6).

Можно выделить асимптотики решения уравнения (14) в следующих двух случаях. Первый из них соответствует ситуации вблизи порога, когда энергия ТГц кванта и энергия связи Ферми-полярона отличаются на величину, много меньшую энергии Ферми: $0 < \hbar\omega - |E_{FP}| \ll E_F$. В этом случае корреляции играют определяющую роль, так как электрон-дырочные пары свободного состояния (10) находятся вблизи поверхности Ферми, при этом темп прямого процесса имеет вид:

$$W_{\text{dir}} \approx I \times \frac{8\pi\alpha e^{(M_X/M_T)^2} \hbar^2}{3} \frac{\sqrt{M_X^3/M_e^3}}{M_T} \frac{E_T (\hbar\omega - |E_{FP}|)^{3/2}}{(\hbar\omega)^4 \sqrt{E_F}} \theta(\hbar\omega - |E_{FP}|). \quad (15)$$

Асимптотика $(\hbar\omega - |E_{FP}|)^{3/2}$ является основным результатом этого раздела. Она подробно показана на вставке к рис. 5. Без учёта корреляций между трионом и резидентными носителями заряда вблизи порога имеет место линейная зависимость от расстройки $\hbar\omega - |E_{FP}|$, см. (6). Следует отметить, что учёт членов, малых по параметру $1/\ln(E_T/E_F)$, приводит лишь к изменению префактора в уравнении (15), но степенной закон остаётся тем же. Рост темпа прямого процесса W_{dir} вблизи порога с увеличением

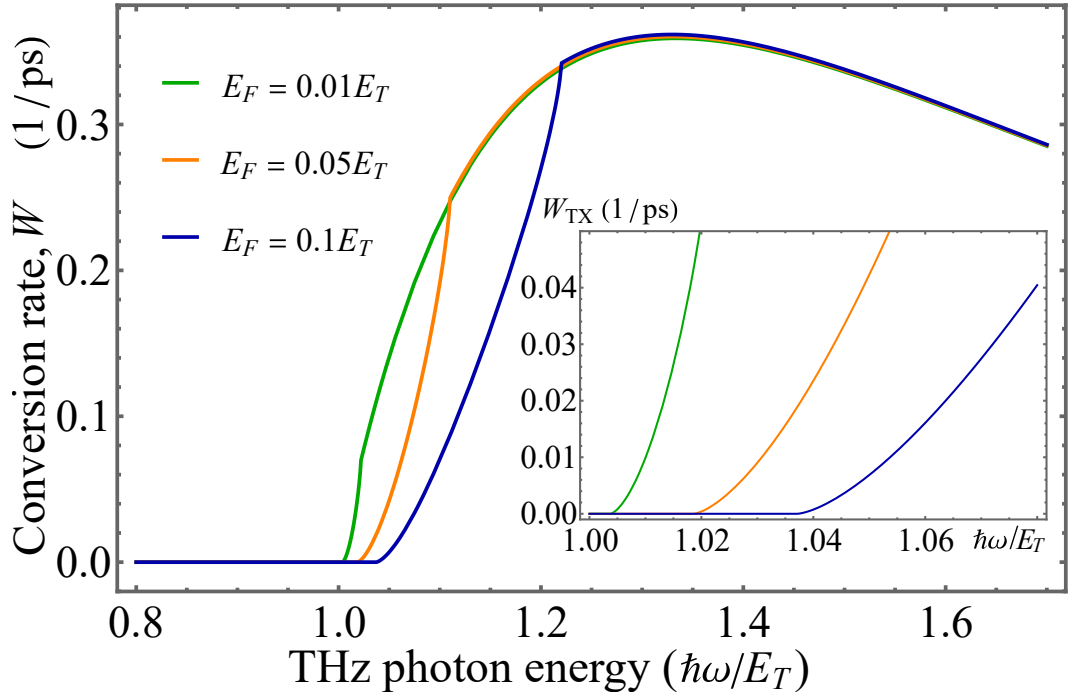


Рис. 5: Зависимость темпа прямого перехода $W_{\text{dir}}(\omega)$ от энергии терагерцового кванта в единицах энергии триона для различных значений энергии Ферми. На вставке показана асимптотика $W_{\text{dir}}(\omega)$ вблизи порога при $\hbar\omega - |E_{FP}| \ll E_F$, пропорциональная $(\hbar\omega - |E_{FP}|)^{3/2}$. Параметры расчёта [17, 32]: $E_T = 25$ мэВ, $I = 1.25$ мкДж/(см²·пс), $M_e = 0.5 M_0$, $M_x = 1.1 M_0$, где M_0 – масса свободного электрона.

$\hbar\omega$ связан с тем, что для более высоких частот ТГц-диапазона существует больший набор возможных состояний электрон-дырочных пар. В частности, среди конечных состояний непрерывного спектра возбуждаемый электрон (т.е. положение дырки) может находиться всё глубже над поверхностью Ферми, и при $\hbar\omega - |E_{FP}| = 4(M_e/M_x)E_F$ все электроны из моря Ферми участвуют в ТГц-индуцированном переходе. Данная точка соответствует излому на кривых на рис. 5.

Второй случай, в котором можно получить явную аналитическую зависимость, соответствует дальнейшему увеличению $\hbar\omega$, т.е. области $\hbar\omega > -E_{FP} + 4(M_e/M_x)E_F$. В этом случае темп индуцированных переходов имеет вид:

$$W_{\text{dir}} \approx I \times \frac{4\alpha\pi^2\mu\hbar^2 E_T}{M_e^2} \frac{\hbar\omega - |E_{FP} + \beta E_F|}{(\hbar\omega)^4}; \quad \beta = \frac{M_x}{4M_T} \frac{e^{(\frac{M_x}{M_T})^2} - 1 - \left(\frac{M_x}{M_T}\right)^2}{\sinh^2 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{M_x}{M_T}\right)^2 \right]}. \quad (16)$$

В этом диапазоне кривые сливаются, как видно на рис. 5. Это происходит в силу малого отличия выражения под модулем от энергии триона:

$$|E_{FP} + \beta E_F + E_T|/E_F \approx \frac{1}{12}(M_x/M_T)^3 + O((M_x/M_T)^7/2^{7/2}) \ll 1$$

для рассматриваемых отношений масс M_x/M_T . В случае представленном на рис. 5, вышеуказанное слагаемое равно 0.03. При этом, как было указано выше, для двухчастичного рассмотрения положение максимума и высокочастотная асимптотика определяются волновой функцией; в данном случае максимуму соответствует частота $\hbar\omega \approx 4E_T/3$.

3.2 Учёт уширения спектральных линий

В реальной системе присутствует беспорядок, а эксперименты выполняются при ненулевой температуре. Это приводит к тому, что у трионных и экситонных состояний время жизни становится конечным и к уширению их спектральных линий, из-за чего при расчёте темпа переходов нужно заменить дельта-функцию лоренцианом:

$$W_{\text{dir}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{p,q} |\Upsilon_0(p,q)|^2 \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(E_{FP} + \hbar\omega - \varepsilon_{-p+q}^X - \varepsilon_p + \varepsilon_q)^2 + \Gamma^2}. \quad (17)$$

Введённая величина Γ — это эффективная ширина линии, полученная в результате свёртки ширин линий для притягивающего и отталкивающего Ферми-поляронов. Она, как правило, имеет два вклада. Первый из них связан с неоднородным уширением резонансов, обусловленным наличием плавного (на масштабах длины волны кулоновских комплексов) беспорядка в образце. Этот неоднородный вклад практически не зависит от температуры и довольно мал в высококачественных инкапсулированных образцах дихалькогенидов переходных металлов. Другой, однородный, вклад в Γ связан с процессами рассеяния Ферми-поляронов как на свободных носителях заряда, так и на фононах. Это слагаемое существенно зависит от температуры, ввиду того, что от

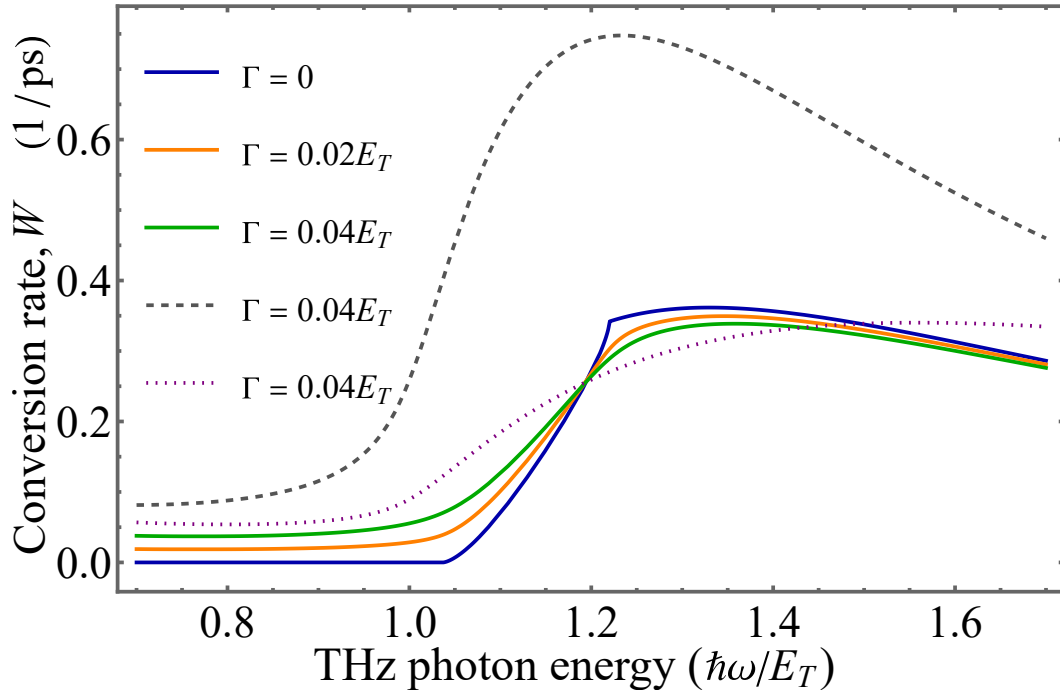


Рис. 6: Зависимость темпа прямого перехода $W_{\text{dir}}(\omega)$ от энергии терагерцового кванта в единицах энергии триона при различных ненулевых параметрах уширения Γ .

Штрихованная линия вычислена в трионном приближении [17] с экситонным радиусом $a = 1$ нм и радиусом триона $b = 3$ нм; пунктирная линия вычислена аналогично, но с параметрами $a = 0.6$ нм, $b = 1.1$ нм. Энергия Ферми $E_F = 0.1E_T$, остальные используемые параметры такие же, как на рис. 5.

температуры зависит концентрация фононов и степень вырождения газа резидентных носителей заряда. В случае $\Gamma \ll E_F$ при расчёте матричного элемента перехода $\Upsilon_0(p,q)$ можно пренебречь модификацией волновых функций поляронов. Естественно, в случае $\Gamma \sim E_F$ разница между расчётами с учётом и без учёта корреляций с морем Ферми незначительна [22]. Результаты расчётов по уравнению (17) показаны на рис. 6. Типичные значения Γ можно оценить по экспериментальным данным и модельным соображениям [33], см. также [17, 34]: в диапазоне температур решётки 5–30 К значения Γ

находятся в диапазоне 1...10 мэВ. Таким образом, основной эффект от рассеяния проявляется вблизи пороговой энергии и заключается в сглаживании порога поглощения и размывании корреляций. При $\hbar\omega > E_T$ учёт уширения лишь незначительно уменьшает скорость перехода.

Для сравнения пунктирные и точечные кривые на рис. 6 показывают результаты трионного подхода, разработанного в работе [17]. В этом случае электрон-экситонные корреляции в конечном состоянии и корреляции триона с дыркой в фермиевском море игнорируются. Кроме того, в работе [17] используется хорошо известная экспоненциальная форма волновой функции относительного движения (подробности о вариационном подходе к трионной проблеме см. в работе [9]). Для экспериментально значимых параметров (пунктирная кривая) скорость перехода примерно в два раза больше нашего результата. Эта разница является следствием формы волновой функции относительного движения: в изложенном здесь короткодействующем Ферми-поляронном приближении используется модифицированная функция Бесселя, а не экспоненциальный фит. Подбирая радиусы экситона и триона (пунктирная кривая), мы можем получить приемлемое соответствие в величине скорости перехода, но форма различается как вблизи края ТГц-поглощения, так и на высоких частотах. Отличия при частотах $\hbar\omega \approx E_T$ связаны со вкладом корреляций в точном расчёте, а при $\hbar\omega \gg E_T$ с формой волновой функции относительного движения, которая приводит к различному Фурье-образу связанного состояния и, как следствие, к иной зависимости темпа перехода W_{dir} от энергии ТГц кванта, см. раздел 2.1.

4 Разогрев электронного газа

Как было продемонстрировано в экспериментальной работе [17], использование терагерцовых электромагнитных пикосекундных импульсов с флюенсом энергии $\phi \sim 1$ мкДж/см², что соответствует мощности излучения порядка мкДж/(см²·пс), приводит к эффективной конверсии между притягивающими Ферми-поляронами (трионами) и отталкивающими Ферми-поляронами (экситонами). Однако при столь больших интенсивностях излучения необходимо уделить отдельное внимание сопутствующему разогреву электронного газа в результате друдевского поглощения терагерцового импульса. Как показывают аналогичные эксперименты [35], разогрев электронного газа может составлять десятки кельвин, что соответствует кинетической энергии в десятки доли от энергии связи триона $k_B T \sim 0.1 - 0.3 E_T$. Тем самым сопутствующий нагрев электронного газа делает возможным процесс диссоциации трионов за счёт столкновения с горячими электронами, о котором пойдёт речь в следующем разделе.

4.1 Матричный элемент рассеяния

Нагрев электронного газа терагерцовым излучением в основном связан с процессами друдевского поглощения, при которых электроны поглощают фотоны и рассеиваются на статичных дефектах или фононах. Для описания данных процессов мы используем второй порядок теории возмущений в приближении высокочастотного поля $\omega \tau_{tr} \gg 1$, где τ_{tr} — время релаксации импульса и составляет десятки доли пикосекунды.¹ В этом случае матричный элемент перехода из состояния $\mathbf{k}$ в $\mathbf{k}'$ с поглощением фотона выражается следующим образом:

$$\Upsilon_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = -\frac{1}{\hbar\omega} \langle \mathbf{k}' | [\hat{H}_{l-e}, \hat{H}_m] | \mathbf{k} \rangle, \quad (18)$$

где $\hbar\omega$ — энергия фотона, $\hat{H}_{l-e}$ — гамильтониан взаимодействия света, представленный в уравнении (4), а $\hat{H}_m$ — гамильтониан, описывающий рассеяние, то есть процессы, не сохраняющие импульс электронного газа. Далее подробно остановимся на вкладах от различных процессов.

4.2 Рассеяние на точечных дефектах

Для начала рассмотрим рассеяние на статических точечных дефектах. В этом случае гамильтониан $\hat{H}_m$ имеет вид:

$$\hat{H}_m \equiv \hat{H}_D = \frac{u}{S} \sum_{i,\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_i} \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad (19)$$

где $\mathbf{R}_i$ — координата i -го дефекта, u — эффективная мощность дефекта. Для простоты будем считать все дефекты идентичными. В данном приближении матричный элемент (18) записывается следующим образом:

$$\Upsilon_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^D = \frac{eu(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{A}}{c\omega S M_e} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_i}. \quad (20)$$

Так как расположение дефектов случайно, можно пренебречь интерференционными слагаемыми от разных примесей и представить $|\Upsilon_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^D|^2$ в виде

$$|\Upsilon_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^D|^2 \approx \frac{n}{S} \left(\frac{eu(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{A}}{cM_e\omega} \right)^2. \quad (21)$$

¹Для типичных параметров оценки эксперимента [35] показывают, что $\omega \tau_{tr} \sim 10$. Случай низкочастотного поля рассмотрен в гл. 6.

Здесь n – концентрация дефектов. Таким образом, мощность поглощения электромагнитного излучения на единицу площади (эта же величина соответствует мощности разогрева электронного газа, так как рассеяние на примесях является упругим) определяется следующим выражением [36]:

$$Q_D = \hbar\omega \times 2 \times \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} |\Upsilon_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^D|^2 (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega), \quad (22)$$

где $f_{\mathbf{k}}$ – равновесная функция распределения Ферми-Дирака; дополнительный множитель 2 возникает из суммирования по долинному индексу. При низких плотностях электронов, когда $\hbar\omega \sim E_T \gg E_F$, что характерно для упомянутых выше экспериментов, темп разогрева электронного газа принимает следующий вид:

$$Q_D = \frac{4\pi}{c} I \times \frac{n_e e^2}{2\tau_{tr} \omega^2 M_e} \times \left(1 + \frac{2k_B T}{\hbar\omega}\right) \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}\right), \quad (23)$$

где n_e – плотность электронного газа, $\tau_{tr}^{-1} = nu^2 M_e / \hbar^3$ – время релаксации импульса в случае рассеяния на точечных дефектах, T – температура электронного газа. Так как слагаемые, описывающие температурные поправки, важны лишь при $k_B T \sim \hbar\omega \gg E_F$, то при их расчёте использовалось распределение Больцмана. Также заметим, что для высокочастотного предела друдевского поглощения в металлах, для которого справедливо $\hbar\omega \gg E_F$, результат отличается в два раза. В случае классического предела $k_B T \gg \hbar\omega$ формула (23) принимает стандартный вид.

4.3 Рассеяние на фононах

Второй существенный механизм поглощения связан с рассеянием электронов на продольных акустических и оптических фононах. В монослоях дихалькогенидов переходных металлов они во многом определяют время рассеяния [37, 38] и тепловой обмен электронов с решёткой [35, 39]. Гамильтониан электрон-фононного взаимодействия записывается следующим образом:

$$\hat{H}_{DP} = i \times \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\lambda}(\mathbf{q})S} \right)^{1/2} M_{\lambda}(\mathbf{q}) (\hat{b}_{\lambda, \mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\lambda, \mathbf{q}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}), \quad (24)$$

где ρ – двумерная плотность кристалла, индекс λ нумерует фононные ветви с дисперсией $\omega_{\lambda}(\mathbf{q})$ и матричным элементом $M_{\lambda}(\mathbf{q})$. Соответствующие операторы уничтожения и рождения фононов обозначены как $\hat{b}_{\lambda, \mathbf{q}}$, $\hat{b}_{\lambda, \mathbf{q}}^{\dagger}$. Далее мы будем использовать упрощённый подход, предложенный в работе [40], где для взаимодействия с акустическими фононами рассматривается деформационный потенциал (ввиду слабости пьезоэлектрического эффекта в двумерных системах). В этом случае для продольной акустической ветви ($\lambda = LA$) вышеизложенные величины имеют вид: $\omega_{LA} = sq$ (s – скорость звука) и $M_{LA}(\mathbf{q}) = \Xi q$ (Ξ – деформационный потенциал). Вклад оптических фононов ($\lambda = O$) мы будем моделировать одной ветвью, считая частоту ω_O и матричный элемент $M_O(\mathbf{q}) = D_0$ постоянными [40]. При этом матричный элемент перехода (18) с рассеянием на фононах записывается как:

$$\Upsilon_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{\lambda} = -i \frac{e}{cM_e} \left(\frac{\hbar |M_{\lambda}(\mathbf{q})|^2}{2\rho\omega_{\lambda}(\mathbf{q})S} \right)^{1/2} \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{A}}{\omega}. \quad (25)$$

Как будет показано ниже, процессы, учитывающие длинноволновые акустические фононы, важны при относительно больших $\hbar\omega$ и малых T , поэтому для мощности по-

глощения имеет место следующее выражение²:

$$Q_{LA} = \hbar\omega \times \frac{2\pi}{\hbar} n_e \sum_{\mathbf{k}'} |\Upsilon_{0,\mathbf{k}'}^{LA}|^2 (1 + 2N_{\mathbf{k}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \hbar\omega) \\ = \frac{4\pi}{c} I \times \frac{n_e e^2 \Xi^2 M_e^{1/2}}{\hbar \rho s (2\hbar\omega)^{3/2}} \coth \left(\frac{s \sqrt{M_e \omega / 2\hbar}}{k_B T_l} \right). \quad (26)$$

Здесь $N_{\mathbf{k}}$ – функция распределения Бозе для ЛА-фононов с температурой решётки T_l . При этом для рассматриваемых нами волновых векторов величина $1 + 2N_{\mathbf{k}}$ не сильно отличается от единицы. В отличие от случая рассеяния на точечных дефектах (23), рассеяние на продольных акустических фононах приводит к степенной зависимости $\omega^{-3/2}$ вместо ω^{-2} . Это является следствием того, что энергия фонона, испускаемого в данном процессе, зависит от энергии ТГц кванта: $\sqrt{\hbar\omega M_e s^2} \gg k_B T_l$. Заметим также, что при низких частотах, когда $\sqrt{\hbar\omega M_e s^2} \ll k_B T_l$, ответ сводится к стандартному выражению для дурде-поглощения.

Поглощаемая электронным газом мощность на единицу площади при рассеянии на оптических фононах может быть выражена в следующей форме:

$$Q_O = (\hbar\omega - \hbar\omega_O) \times 2 \times \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} |\Upsilon_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^O|^2 \times f_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega + \hbar\omega_O), \quad (27)$$

где учтена малость температуры решётки по сравнению с энергией оптического фонона $T_l \ll \hbar\omega_0$, ввиду чего возможны лишь спонтанные процессы, а индуцированными процессами можно пренебречь из-за слабой заселённости фононных состояний. Считая электронный газ невырожденным, можно преобразовать выражение [?] к виду:

$$Q_O = \frac{4\pi}{c} I \times \frac{n_e e^2}{2\omega^2 M_e} \times \frac{(D_0)^2 M_e}{2\rho \hbar^2 \omega_O} \times \frac{(\hbar\omega - \hbar\omega_O)(|\hbar\omega - \hbar\omega_O| + 2k_B T)}{(\hbar\omega)^2} \\ \times \left[1 - \theta(\hbar\omega_O - \hbar\omega) \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega_O - \hbar\omega}{k_B T}} \right) \right]. \quad (28)$$

Характерной особенностью данного процесса является то, что взаимодействие электронов с оптическими фононами может приводить как к нагреву электронного газа (при $\hbar\omega > \hbar\omega_O$), так и к его охлаждению (при $\hbar\omega < \hbar\omega_O$), см. [36]. Однако в последнем случае эффективность охлаждения пропорциональна доле электронов с достаточно высокими энергиями $\varepsilon_{\mathbf{k}} \gtrsim \hbar\omega_O - \hbar\omega$. Это приводит к тому, что зависимость разогрева электронного газа от частоты ТГц-излучения в процессе с испусканием оптического фонона является немонотонной.

4.4 Температура электронного газа

При расчёте температуры электронного газа для простоты мы будем описывать электроны квазиравновесным распределением, параметризованным плотностью электронов n_e , которая остаётся постоянной при облучении ТГц-излучением, и температурой T . Фактический вид функции распределения электронов, определяемая из полного кинетического уравнения, может быть иной, но для наших целей достаточно определить

²Можно проверить, что для ТГц-частот соответствующая энергия акустического фонона $\sim \sqrt{\hbar\omega M_e s^2} \ll \hbar\omega$. Поэтому энергией, отданной в решётку за счёт фонона, можно пренебречь и считать столкновение квазиупругим: $\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \approx \hbar\omega$. Кроме того, слагаемым $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ в законе сохранения, описывающим начальную энергию электрона, можно пренебречь ввиду малости энергии Ферми.

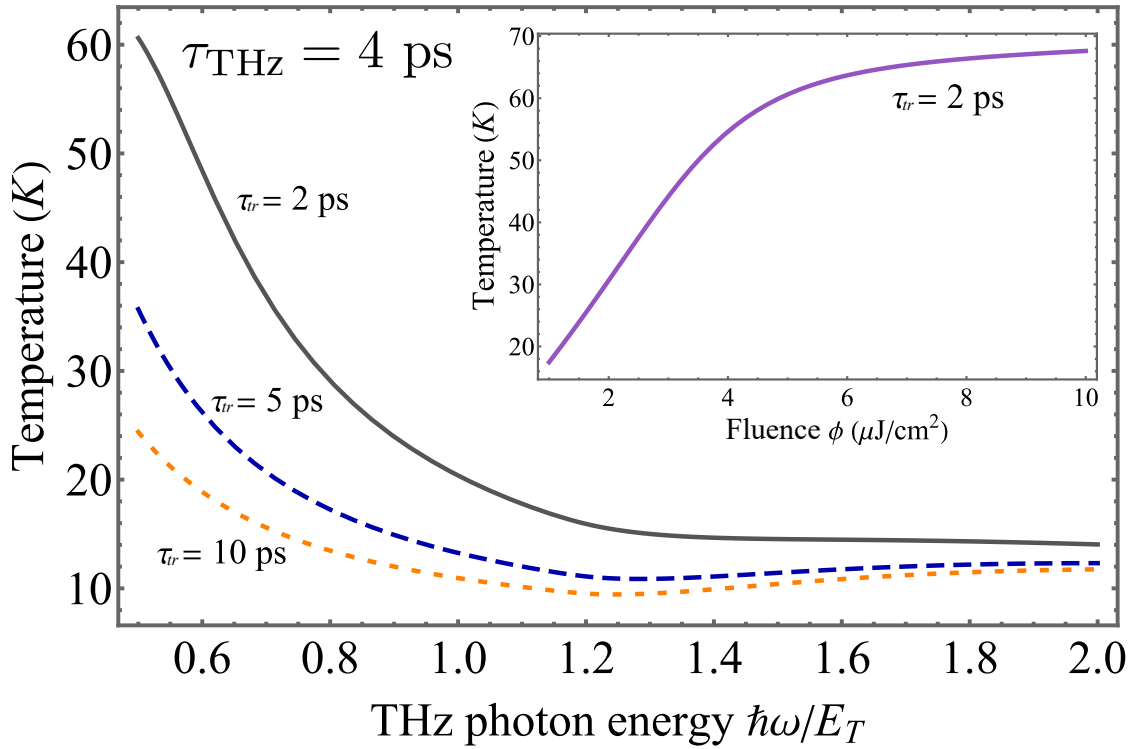


Рис. 7: Зависимость температуры электронного газа T сразу после ТГц-импульса, рассчитанная по уравнению (29) для различных времён рассеяния τ_{tr} на статических точечных дефектах, как функция частоты ТГц-излучения. На вставке показана зависимость температуры электронного газа T от флюенса энергии ТГц-импульса ϕ при $\tau_{tr} = 2$ пс и $\hbar\omega = 0.5E_T$. Параметры вычислений: температура решётки $T_l = 5$ К, длительность ТГц-импульса $\tau_{THz} = 4$ пс, $E_F = 0.1E_T$, $\phi = I\tau_{THz} = 5$ мкДж/см², $D_0 = 5.2 \cdot 10^8$ эВ/см, $\Xi = 3.4$ эВ, $\rho = 4.46 \cdot 10^{-7}$ г/см², $s = 4.1 \cdot 10^5$ см/с, $\tau_{LA} = 30$ пс, остальные параметры такие же, как на рис. 5. Здесь мы аппроксимировали теплоёмкость электронного газа кусочно заданной функцией: $C(T) \approx C_F^{2D}(T)$ для $k_B T < 3E_F/\pi^2$ и $C(T) \approx C_B^{2D}$ в случае $T > 3E_F/\pi^2$.

лишь характерную температуру электронного газа, которая контролирует соответствующие процессы рассеяния электронов на экситонах и трионах (ферми-поляронах). Для определения температуры электронного газа T при облучении ТГц-излучением необходимо решить уравнение теплового баланса:

$$\frac{d}{dt} \int_{T_l}^{T(t)} C(T') dT' \equiv C(T) \frac{dT}{dt} = (Q - Q_l), \quad (29)$$

где $C(T)$ обозначает теплоёмкость электронного газа, $Q = Q_D + Q_{LA} + Q_O$ – темп разогрева электронного газа за счёт друдевского поглощения, а Q_l – темп охлаждения электронного газа из-за теплообмена с решёткой. Теплоёмкость $C(T)$ обладает двумя асимптотиками:

$$C(T) = \begin{cases} \frac{\pi^2}{3} n_e k_B \frac{k_B T}{E_F}, & k_B T \ll E_F, \\ n_e k_B, & k_B T \gg E_F, \end{cases} \quad (30)$$

соответствующими вырожденному и классическому случаю. Для упрощения вычислений мы будем использовать кусочно заданную аппроксимацию для $C(T)$, основанную на двух асимптотических выражениях для теплоёмкости электронного газа (30).

Охлаждение электронного газа происходит в результате испускания продольных акустических и оптических фононов. Таким образом, темп потерь энергии Q_l можно

записать следующим образом:

$$Q_l = C(T) \frac{(T - T_l)}{\tau_{LA}} + R_O, \quad (31)$$

где темп потерь энергии за счёт испускания акустических фононов описывается временем релаксации τ_{LA} [41, 42], не зависящим от температуры,

$$\frac{1}{\tau_{LA}} = \frac{2M_e^2 |\Xi|^2}{\rho \hbar^3}, \quad (32a)$$

с характерной величиной $\tau_{LA} \sim 10 \dots 50$ пс [35]. Испускание оптических фононов приводит к потере энергии в форме [41]:

$$R_O = \frac{|D_0|^2 M_e}{2\rho \hbar} n_e e^{-\frac{\hbar\omega_O}{k_B T}}. \quad (32b)$$

Следует отметить, что уравнение (32b) справедливо для $T \gg T_l$, в то время как вклад в охлаждение электронов за счёт оптических фононов при $T \sim T_l$ для низких и умеренных температур пренебрежимо мал. Температура электронного газа сразу после ТГц-

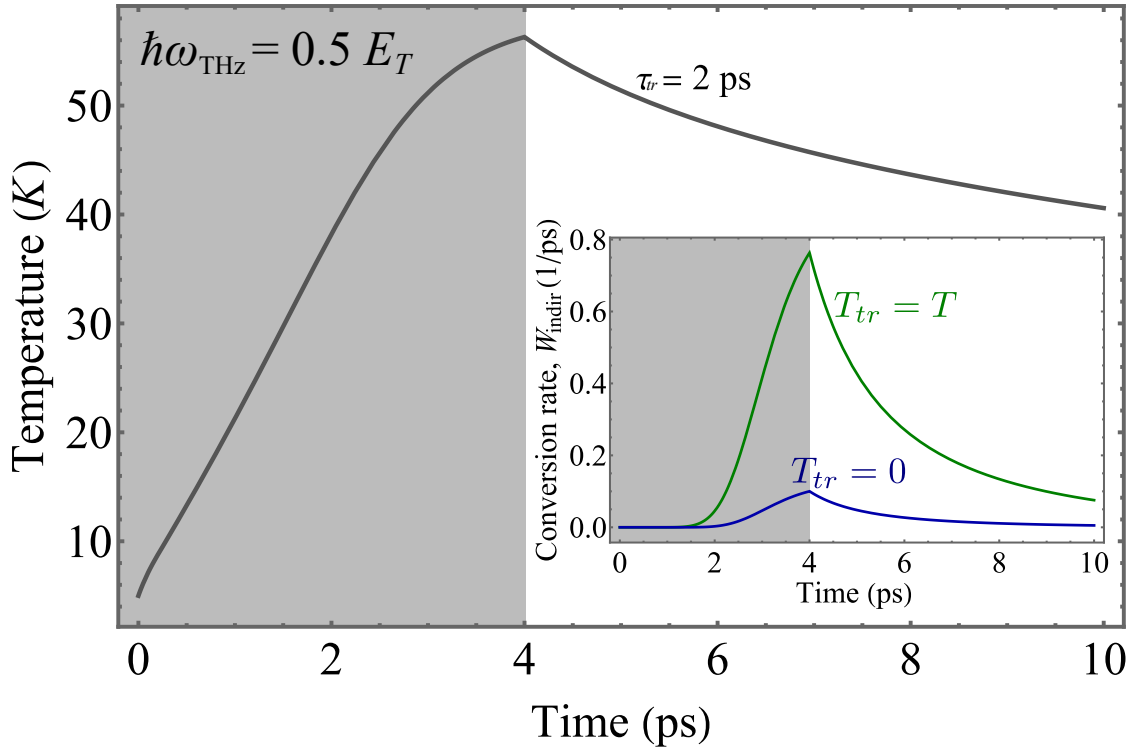


Рис. 8: Временная зависимость температуры электронного газа, рассчитанная по уравнению (29) для $\tau_{tr} = 2$ пс, $\hbar\omega_{\text{THz}} = 0.5 E_T \approx 12.5$ мэВ. На вставке показан темп процесса ударной диссоциации как функция времени (см. следующий раздел). Серой областью обозначен временной промежуток ТГц-импульса. Параметры расчёта такие же, как на рис. 7.

импульса, рассчитанная на основе решения уравнения (29), показана на рис. 7. Анализ показывает, что разогрев в основном связан с поглощением ТГц-фотонов при рассеянии на точечных дефектах (23), в то время как охлаждение преимущественно происходит за счёт нелинейных процессов, связанных с испусканием оптических фононов (см. уравнения (28) и (32b)). Это особенно выражено при низкой энергии ТГц-фотонов, где друдевское поглощение особенно сильно, а температуры высоки. Рассеяние на акустических

фононах становится существенным только при относительно высоких частотах ТГц-излучения $\hbar\omega > E_T$, где температура электронного газа достигает относительно низких значений 10–20 К. Экспоненциальная активация охлаждения за счёт оптических фононов при увеличении флюенса ТГц импульса приводит к насыщению температуры (см. вставку на рис. 7). На рис. 8 показана зависимость температуры электронного газа от времени, которая во время действия ТГц-импульса сначала практически линейно возрастает из-за поглощения Друде, а затем начинается этап насыщения, когда начинают играть роль изложенные выше процессы охлаждения. После окончания импульса (конец заштрихованной области на рис. 8) температура снижается в результате испускания фононов.

5 Процесс ударной диссоциации

Как было показано в предыдущей главе, разогрев электронного газа за счёт терагерцового импульса может приводить к значительному увеличению температуры электронного газа, тем самым в системе оказывается значительное количество резидентных носителей заряда с кинетической энергией порядка энергии связи триона. Рассеяние притягивающих поляронов (трионов) такими высокоэнергетическими электронами также может приводить к преобразованию поляронов из притягивающих в отталкивающие. Такой процесс можно рассматривать как своего рода процесс «встряхивания», при котором возбуждённое фермиевское море воздействует на поляроны. Он, в свою очередь, имеет ту же природу, что и переходы между связанными и делокализованными экситонами [43–45], и ударная ионизация экситонов [46]. Матричный элемент данного процесса имеет вид:

$$M_{ub\pm} = \frac{2\pi^{1/2}\kappa}{S^{3/2}} [V_c(|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}|) \pm V_c(|\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}|)] \times \frac{\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_x, \mathbf{k}+\mathbf{K}}}{\kappa^2 + \left(\mathbf{k}_x - \frac{m_x}{m_x+m_e}\mathbf{K}\right)^2}. \quad (33)$$

Здесь V_c – это матричный элемент кулоновского взаимодействия, $\mathbf{k}$ – начальный волновой вектор «горячего» электрона с кинетической энергией порядка $\varepsilon_{\mathbf{k}} \sim E_T$, $\mathbf{K}$ – волновой вектор триона, $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_x$ – волновые вектора электронов и экситона после диссоциации триона, $\kappa = \sqrt{2\mu E_T/\hbar^2}$ – обратный размер триона. Знак $\pm$ относится к триплетному и синглетному состояниям свободного электрона и электрона в трионе соответственно. В выражении (33) мы не учитываем корреляции с морем Ферми. Данное качественное рассмотрение основано на том, что в процессе диссоциации трионов за счёт столкновений участвуют частицы с кинетической энергией $\varepsilon_{\mathbf{k}} \gg E_F$. Помимо этого, как будет показано далее, ударная диссоциация становится существенной только при относительно больших температурах $T \sim 50$ К. При таких значениях температуры тепловая энергия частиц порядка энергии Ферми $k_B T \gtrsim E_F$, из-за чего роль корреляций также уменьшается [34].

Далее мы рассматриваем электронный газ, описываемый функцией распределения $f_{\mathbf{k}}$, соответствующей определённой температуре T , и невырожденный газ трионов при температуре T_{tr} , описываемый распределением Больцмана $f_{\mathbf{K}}^{T_{tr}}$. Плотность трионов обозначим через n_T . Таким образом, используя золотое правило Ферми, мы получаем темп переходов между трионным и экситонным состояниями за счёт столкновений:

$$W_{\text{indir}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{K} \\ \mathbf{k}_x, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}} \left(\frac{3}{4} |M_{ub-}|^2 + \frac{1}{4} |M_{ub+}|^2 \right) \frac{f_{\mathbf{K}}^{T_{tr}}}{n_T} f_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{K}}^T - \varepsilon_{\mathbf{k}_x}^X - \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - E_T). \quad (34)$$

Здесь мы полагаем температуру электронов достаточно большой и пренебрегаем принципом Паули в конечном состоянии. В наших вычислениях используется следующее выражение для кулоновского взаимодействия:

$$V_c(\mathbf{q}) = \frac{2\pi e^2}{\varepsilon q}, \quad (35)$$

где ε – эффективная диэлектрическая проницаемость в образце (на рис. 9 и рис. 10 $\varepsilon = 4$). Так как типичные волновые векторы рассеяния $q \sim \kappa \gg k_F$, то эффектом экранирования за счёт свободных электронов можно пренебречь.

На рис. 9 показана зависимость W_{indir} от температуры электронного газа T . Эта зависимость является резкой и хорошо описывается экспоненциальным приближением, см. ниже, так как в рассматриваемом диапазоне температур в диссоциации трионов

могут участвовать лишь частицы с кинетической энергией порядка энергии связи триона, что соответствует экспоненциальным хвостам функции распределения. Для малых волновых векторов матричный элемент перехода (33) практически не зависит от волновых векторов, что позволяет ввести следующее эффективное выражение для темпа переходов в случае низких температур:

$$W_{\text{indir}} \approx w_0 n_e \frac{k_B T}{E_T} \exp \left(-\frac{\alpha E_T}{k_B T} \right), \quad (36)$$

где размерный префактор w_0 и безразмерный множитель α в показателе степени слабо зависят от температур трионного и электронного газов.

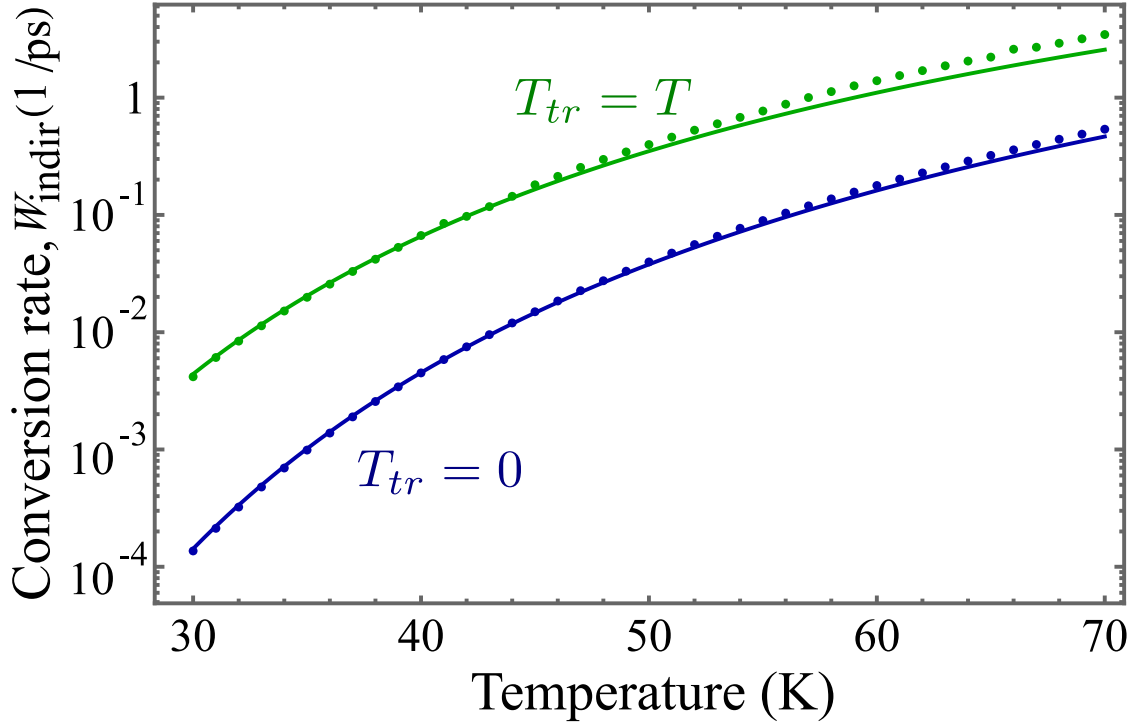


Рис. 9: Зависимость темпа переходов за счёт ударной диссоциации W_{indir} (уравнение (34)) от температуры электронного газа. Синие точки соответствуют темпу перехода для трионов с $\mathbf{K} = 0$, зелёные – темпу перехода с температурой трионов, равной температуре электронного газа. Сплошные линии соответствуют аппроксимации (36) с электронной плотностью $n_e = 5.8 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($E_F = 0.1 E_T$) и префакторами $w_0 = 1.16 \times 10^3 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$ и $0.76 \times 10^3 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$, найденными по наилучшей аппроксимации численных вычислений.

Можно показать, что экспоненциальный множитель имеет следующую простую зависимость от температур сталкивающихся компонент:

$$\frac{\alpha}{T} = \frac{(M_e + M_T)}{T_{tr} M_e + T M_T}. \quad (37)$$

В частности, при одинаковых температурах электронов и трионов показатель в экспоненте минимален $\alpha = 1$. В случае «холодных» трионов ($T_{tr} = 0$ или, что эквивалентно, мы рассматриваем трион с $\mathbf{K} = 0$) данная величина принимает максимальное значение $\alpha = 1 + M_e/M_T$. Таким образом, величина αE_T имеет смысл эффективного порога реакции. Такая экспоненциальная зависимость типична для процессов ударной ионизации и диссоциации. Аналитическое выражение (36) довольно хорошо описывает скорость

перехода W_{indir} и перестаёт работать при температурах $k_B T \rightarrow E_T$, где показатель степени становится сравним с единицей; см. небольшие отклонения на рис. 9 при самых высоких температурах. Важно отметить, что при температурах $T \gtrsim 50$ К скорость перехода W_{indir} начинает становиться значительной по сравнению со скоростью прямого ТГц-индуцированного перехода от триона (притягивающего полярона) к экситону (отталкивающему полярону) W_{dir} , показанной на рис. 5.

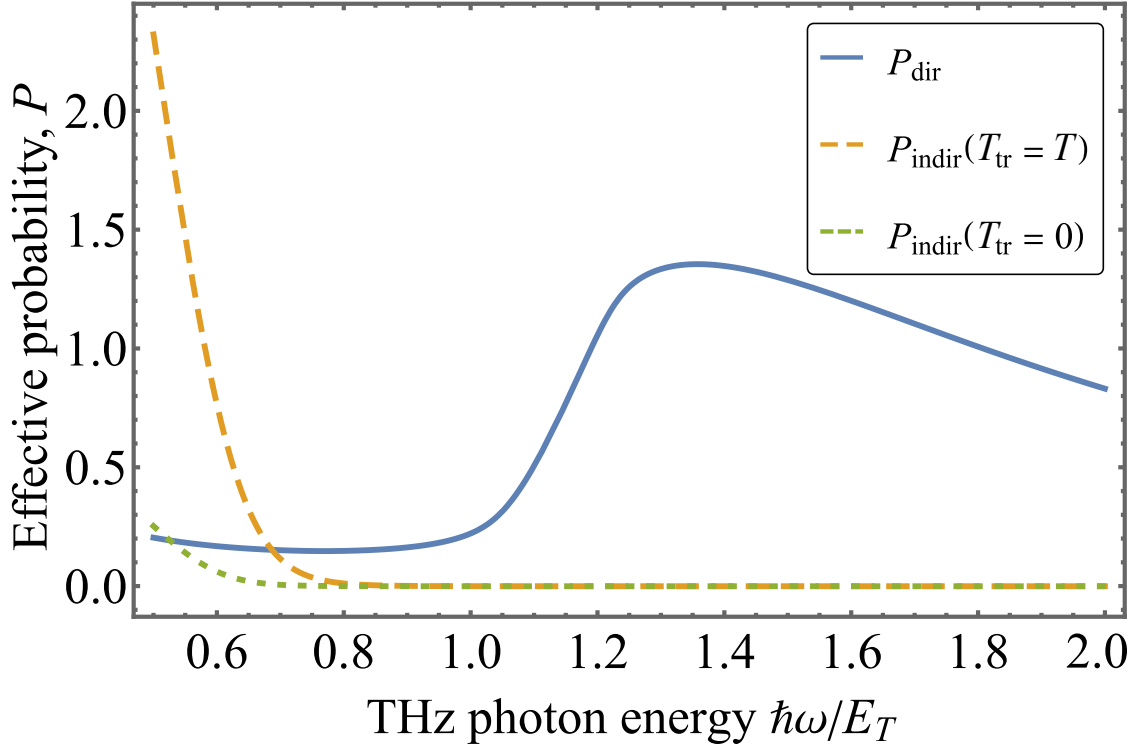


Рис. 10: Зависимость эффективной вероятности P (38) от частоты ТГц-излучения при флюенсе энергии ТГц-импульса $\phi = 5$ мкДж/см² и $\tau_{\text{THz}} = 4$ пс. Зависимость температуры электронного газа $T(\omega)$ для $P_{\text{indir}}(T)$ соответствует рис. 7 с $\tau = 2$ пс.

Для сравнения эффективности прямых и непрямых процессов мы вводим интегральную величину:

$$P = \int_0^\infty W(t) dt, \quad (38)$$

где W – темп прямого ($W \equiv W_{\text{dir}}$) или косвенного ($W \equiv W_{\text{indir}}$) процесса. При малых W величина P показывает вероятность превращения притягивающего полярона в отталкивающий за импульс. Значения $P > 1$ соответствуют необходимости учёта процессов обратной конверсии экситонов в трионы (насыщения) и более детальной кинетики поляронов. Подробный расчёт таких процессов выходит за рамки данной главы. В гл. 6 приводится рассмотрение подобной нелинейной динамики системы при $\hbar\omega \ll E_T$. Таким образом, мы используем P в качестве простой, но физически обоснованной меры относительной эффективности процессов. В уравнении (38) скорость перехода W_{dir} постоянна только во время действия импульса, и для прямого процесса $P_{\text{dir}} = W_{\text{dir}} \tau_{\text{THz}}$. Для косвенного процесса W_{indir} зависит от времени через электронную температуру, которая находится из уравнения теплового баланса (29) (см. рис. 8). Заметим, что зависимость W_{indir} от времени, показанная на рис. 8 на малых временах, запаздывает по сравнению с временной зависимостью температуры. Это связано с тем, что W_{indir} экспоненциально зависит от температуры. По той же причине, как только ТГц-импульс заканчивается, W_{indir} падает значительно быстрее, чем температура. Зависимость эф-

эффективной вероятности P показана на рис. 10. Как и ожидалось, P_{dir} демонстрирует резонансное поведение, повторяющее зависимость W_{dir} от энергии ТГц-фотонов на рис. 8. В отличие от этого, P_{indir} имеет резкий пик при $\omega \rightarrow 0$, где возможен нагрев электронов до относительно высоких температур $T \approx 50 - 60$ К (см. рис. 7).

Ключевым предсказанием данного раздела является возможность эффективной конверсии за счёт разогрева электронного газа в случае низких частот, и наиболее ярко выражено в случае $\hbar\omega \ll E_T$ и $\omega\tau_{tr} \ll 1$. Более подробно динамика в такой системе исследуется в гл. 6.

6 Бистабильность разогрева

В данной части работы рассматривается нелинейная физика, связанная с образованием и диссоциацией многочастичных кулоновских комплексов [47, 48]. Скорость ударной диссоциации и образования многочастичных комплексов нелинейно зависят от плотности. При низких плотностях частиц темп этих процессов пропорционален произведению плотностей участвующих частиц. Также темп ударной диссоциации экспоненциально зависит от температуры. Это может приводить к различным нелинейным эффектам; известно, что в объёмном кремнии при постоянной фотогенерации разогрев микроволновым полем приводит к автоколебаниям плотностей несвязанных электронно-дырочных пар и экситонов [46, 49]. Как будет показано ниже, в нашем случае разогрев системы экситонов, трионов и электронов в присутствии постоянной фотогенерации может приводить к бистабильности [50–53] температуры и других наблюдаемых величин.

6.1 Динамические уравнения

Рассмотрим монослой n -легированного MoSe_2 в актуальном для экспериментов диапазоне плотностей резидентных электронов $n_e = 10^{11} \dots 10^{12} \text{ см}^{-2}$ в зоне проводимости (тип носителей заряда не имеет решающего значения). При фотогенерации экситонов плотностью n_X в результате их энергетической релаксации за счёт испускания оптических фононов образуются X^- -трионы, плотность которых мы обозначаем как n_T . Как и раньше, при рассматриваемых плотностях носителей заряда энергия Ферми значительно меньше энергии связи трионов, что обеспечивает их стабильность.

Для эффективного разогрева электронного газа предполагается использовать низкочастотное или статическое электромагнитное поле, удовлетворяющее условию $\omega\tau_{tr} \ll 1$, где, напомним, τ_{tr} — время релаксации импульса резидентных носителей заряда (см. разд. 4.2). Далее предполагается, что $\hbar\omega \ll E_T$ и что прямой экситон-трионный переход через поглощение фотона, рассмотренный в гл. 3, не происходит. Кроме того, рассматриваемый диапазон температур лежит значительно ниже энергии связи экситона, поэтому ионизацией экситонов можно пренебречь. Таким образом, динамические уравнения для концентраций компонент системы имеют следующий вид:

$$\frac{dn_e}{dt} = -\gamma n_e n_X + \frac{n_T}{\tau_T} + \beta n_e n_T, \quad (39a)$$

$$\frac{dn_X}{dt} = G_X - \gamma n_e n_X - \frac{n_X}{\tau_X} + \beta n_e n_T, \quad (39b)$$

$$\frac{dn_T}{dt} = \gamma n_e n_X - \frac{n_T}{\tau_T} - \beta n_e n_T, \quad (39c)$$

$$C \frac{dT}{dt} = Q - Q_l. \quad (39d)$$

Здесь n_e обозначает плотность электронов, не связанных в трионы, G_X — темп фотогенерации плотности экситонов, см. рис. 11(d), T — температура электронного газа (для простоты будем полагать общей для всех компонент системы), C — теплоёмкость электронного газа на единицу площади, τ_X, τ_T — времена жизни экситона и триона соответственно, см. рис. 11(b, d). Q — плотность мощности друде-поглощения (напомним, что в разд. 4.2 рассматривался противоположный предельный случай $\omega\tau_{tr} \gg 1$), Q_l — плотность мощности охлаждения электронного газа. Процесс с темпом $\gamma n_e n_X$ (см. рис. 11(c)) представляет собой связывание экситонов и электронов в трионы, вероятнее всего, с сопутствующей эмиссией оптических фононов. Вклад, обусловленный членом

$\beta n_e n_T$, показанный на рис. 11(а), описывает ударную диссоциацию трионов, рассмотренную в предыдущем разделе. Помимо процесса ударной диссоциации за счёт столкновений электронов с трионами, может происходить ударная диссоциация из-за трион-трионных столкновений. Также экситон-экситонные и экситон-трионные столкновения приводят к Оже-рекомбинации [54]. Перечисленные процессы не меняют качественного поведения системы, и их более подробный анализ приведён в приложении А.4.

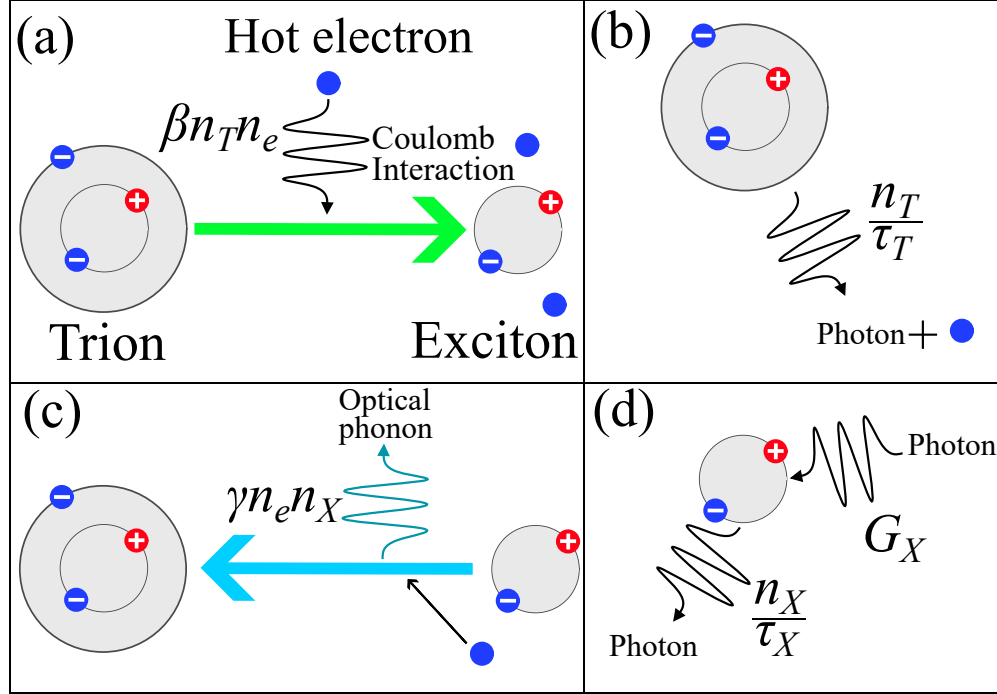


Рис. 11: Диаграмма процессов, описываемых системой уравнений (39): (а) ударная диссоциация трионов с темпом $\beta n_T n_e$ за счёт электронов с энергией порядка E_T ; (б) радиационное затухание триона (n_T/τ_T); при этом испускается оптический фотон, а внешний электрон остаётся в зоне проводимости; (с) Энергетическая релаксация экситонов в трионы с захватом электрона и испусканием оптического фонона ($\gamma n_e n_X$); (d) Фотогенерация экситонов G_X и их последующее радиационное затухание (n_X/τ_X) (см. подробнее в тексте).

Для плотностей компонент системы (39) справедливы следующие простые линейные соотношения:

$$n_e + n_T = n_c, \quad (40a)$$

$$\frac{n_X}{\tau_X} + \frac{n_T}{\tau_T} = G_X, \quad (40b)$$

где первое уравнение соответствует сохранению заряда в зоне проводимости и следует из линейной зависимости уравнений (39a) и (39c). Второе связывает стационарные плотности экситонов n_X и трионов n_T с темпом фотогенерации экситонов G_X . Кроме того, в стационарном режиме темп связывания электронов в трионы компенсируется ударной диссоциацией и радиационным распадом трионов:

$$\gamma n_X n_e = \beta n_T n_e + \frac{n_T}{\tau_T}. \quad (41)$$

Таким образом, поиск стационарного решения системы (39) при заданной температуре сводится к решению следующего квадратного уравнения:

$$\left(\beta + \gamma \frac{\tau_X}{\tau_T} \right) n_e^2 + \left(\gamma \tau_X \left(G_X - \frac{n_c}{\tau_T} \right) + \frac{1}{\tau_T} - \beta n_c \right) n_e - \frac{n_c}{\tau_T} = 0, \quad (42)$$

которое имеет только один корень при выполнении естественного условия $n_e, n_T, n_X > 0$. Как видно на рис. 12, температурная зависимость плотности свободных электронов n_e (синяя сплошная линия) и трионов n_T (оранжевая сплошная линия) имеет ступенчатую форму. При температурах ниже примерно 40 К почти все носители заряда связаны с экситонами в трионы. При дальнейшем повышении температуры происходит резкий рост темпа ударной диссоциации трионов, и равновесная концентрация трионов быстро уменьшается до нуля.

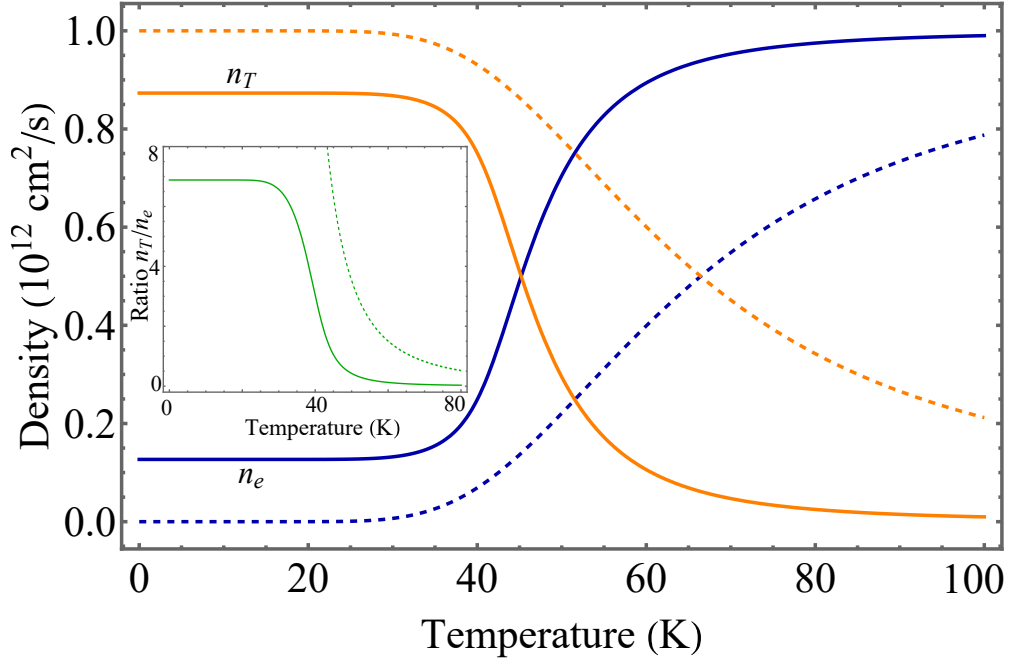


Рис. 12: Зависимость концентрации свободных электронов n_e (синие линии) и концентрации трионов n_T (оранжевые линии) от температуры электронного газа.

Сплошные линии соответствуют стационарному решению уравнений (39) (а–с), пунктирные линии соответствуют решению уравнения Саха (43). На вставке показана

зависимость отношения n_T/n_e от температуры электронного газа. Параметры вычислений: $G_X = 4.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}\text{пс}^{-1}$, $\gamma = 0.1 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$, $n_c = 10^{12} \text{ см}^{-2}$, $\tau_X = \tau_T = 50 \text{ пс}$, $\beta = w_0 \frac{k_B T}{E_T} e^{-\frac{E_T}{k_B T}}$, с $w_0 = 1.16 \cdot 10^3 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$, $E_T = 25 \text{ мэВ}$ [17, 27, 55].

Полезно сравнить найденные выше стационарные концентрации из уравнений (39) с концентрациями, предсказанными уравнением Саха:

$$\frac{n_e n_X}{n_T} = \frac{M_e M_X}{M_T} \times \frac{k_B T}{\pi \hbar^2} e^{-\frac{E_T}{k_B T}}. \quad (43)$$

Результат, полученный из уравнения Саха для сравнения, изображён пунктирными линиями на рис. 12. Несмотря на общее сходство с решением из записанных выше динамических уравнений, есть и явные различия: в частности, при нулевой температуре концентрация электронов из решения уравнения Саха обращается в ноль. Данные различия обусловлены тем, что рассматриваемая нами система (39) не является термодинамически равновесной: в ней присутствует фотогенерация и последующее радиационное затухание экситонов (т.е. источники и затухание), а также имеется обмен энергией с решёткой.

Подход, основанный на решении уравнения (42), применим в случае, когда коэффициенты системы (39) зависят от температуры [55, 56], но в нём не учитываются ферми-или бозе-корреляции между частицами. Это несущественно при низких концентрациях $\lesssim 10^{12} \text{ см}^{-2}$, рассматриваемых в данном случае. При более высоких концентрациях

частиц такие корреляции могут привести к зависимости коэффициентов от концентрации компонентов системы. При этом, можно ожидать, что подобное резкое изменение равновесных концентраций, показанное на рис. 12, сохранится и в случае больших концентраций, когда эффект статистики будет играть роль.

6.2 Разогрев и охлаждение системы

Как уже было уточнено, в отличие от раздела 4, здесь мы рассматриваем ситуацию соизмеримых концентраций трионов и свободных электронов, а также противоположный предел частот, т.е. случай низкочастотного поля $\omega\tau \ll 1$. Тогда в квазичастичном рассмотрении друдевское поглощение содержит вклады от свободных электронов и трионов следующего вида:

$$Q = E \times j = E^2 \times \left(\frac{e^2 n_e \tau_{e,tr}}{M_e} + \frac{e^2 n_T \tau_{T,tr}}{M_T} \right). \quad (44)$$

Мощность охлаждения системы на единицу площади будет состоять из трёх вкладов:

$$Q_l = Q_{LA} + Q_O + Q_I, \quad (45)$$

где Q_{LA} и Q_O отвечают охлаждению за счёт продольных акустических и оптических фононов, аналогично разделу 4, но включают в себя вклады от электронов, экситонов и трионов. Новое слагаемое Q_I – это потери энергии за счёт ударной диссоциации трионов. Соответствующие вклады имеют вид:

$$Q_{LA} = \left(\frac{n_e}{\tau_{e,LA}} + \frac{n_X}{\tau_{X,LA}} + \frac{n_T}{\tau_{T,LA}} \right) k_B (T - T_l), \quad (46a)$$

$$Q_O = \left(n_e |D_e^{(0)}|^2 M_e + n_X |D_X^{(0)}|^2 M_X + n_T |D_T^{(0)}|^2 M_T \right) \frac{e^{-\frac{\hbar\omega_O}{k_B T}}}{2\rho\hbar} \quad (46b)$$

$$Q_I = E_T \times \beta(T) n_e n_T. \quad (46c)$$

Различие в эффективных массах для электронов и трионов приводит к заметному различию их вкладов в дуде-поглощение и охлаждение:

$$r_D = \frac{Q_T/n_T}{Q_e/n_e} = \left(\frac{M_e u_e}{M_T u_T} \right)^2 \sim 0.1, \quad (47a)$$

$$r_{LA} = \frac{Q_{T,LA}/n_T}{Q_{e,LA}/n_e} = \left(\frac{M_T \Xi_T}{M_e \Xi_e} \right)^2 \sim 10. \quad (47b)$$

Здесь величины u_T, Ξ_T – сила точечных дефектов и деформационный потенциал для триона соответственно. В приведённых выше оценках мы полагаем $u_T = u_e$, $\Xi_T = \Xi_e$ и $M_T = 3M_e$ и используем введённые в разделе 4 характерные времена релаксации импульса и энергии.

В дальнейших вычислениях мы пренебрегаем возможным разогревом или охлаждением системы за счёт связывания электронов и экситонов в трионы, поскольку энергия связи триона и энергия оптического фонона близки для ДПМ монослоёв [55]. Мы также будем пренебрегать вкладом в охлаждение от нейтральных экситонов за счёт испускания оптических фононов, так как, аналогично предыдущему замечанию, $|D_e - D_h|^2 \sim 0.01 \dots 0.1$ [55]. Также мы будем считать фотогенерацию резонансной.

6.3 Бистабильность системы

Стационарная интенсивность I в зависимости от температуры электронного газа T и скорости фотогенерации экситонов G_X определяется из равновесия между мощностью друде-поглощения (44) и скоростью потерь энергии в решётку (46):

$$I(T, G_X) = \frac{Q_I(n_e, n_X, n_T, T)}{\frac{4\pi}{c} \frac{e^2 \tau_{e,tr}}{M_e} (n_e + r_D n_T)}, \quad (48)$$

где для концентраций n_e, n_X, n_T взяты их равновесные значения из уравнений (42). Как показано на вставке к рис. 12, отношение плотностей n_T/n_e демонстрирует ступенчатую зависимость. С учётом разницы в поглощающей и охлаждающей способностях между трионами и электронами, зависимость интенсивности $I(T, G_X)$ от температуры электронного газа T может иметь немонотонный характер. Таким образом, для определённого диапазона интенсивностей I или напряжённостей электромагнитного поля E стационарное решение разветвляется на две устойчивые ветви и одну неустойчивую ветвь (см. рис. 13). Нижняя и верхняя ветви соответствуют низкотемпературному и высокотемпературному плато на рис. 12 соответственно. Состояния ниже нестабильной кривой (красная линия на рис. 13) релаксируют к низкотемпературной ветви, а состояния выше неё — к высокотемпературной ветви. Зелёные вертикальные линии обозначают границы области бистабильности, т.е. петли гистерезиса для различных характеристик системы, включая температуру, электрический ток, поглощённую и прошедшую доли внешнего электромагнитного поля, а также плотность экситонов и трионов.

Область бистабильности на диаграмме (G_X, I) очень чувствительна к параметрам системы, как показано на рис. 14(а-с). При уменьшении разницы в поглощении и охлаждении трионов и электронов, описываемой параметрами r_D и r_{LA} (47), область бистабильности сужается и смещается как в сторону более высоких значений скорости фотогенерации экситонов G_X , так и в сторону большей интенсивности нагрева I (см. рис. 14(а,б)). Это является следствием того, что потеря кинетической энергии при ударной диссоциации трионов $\beta(T)n_e n_T$ резко возрастает с температурой, в результате чего зависимость $I(T)$ становится более монотонной. Таким образом, по мере уменьшения различий в тепловом поведении между свободными электронами и трионами для возникновения бистабильности необходимо подавить вклад $Q_I \sim n_e^2$, и область бистабильности смещается в область параметров с большим отношением n_X/n_e , что отчётливо видно из рис. 14(с).

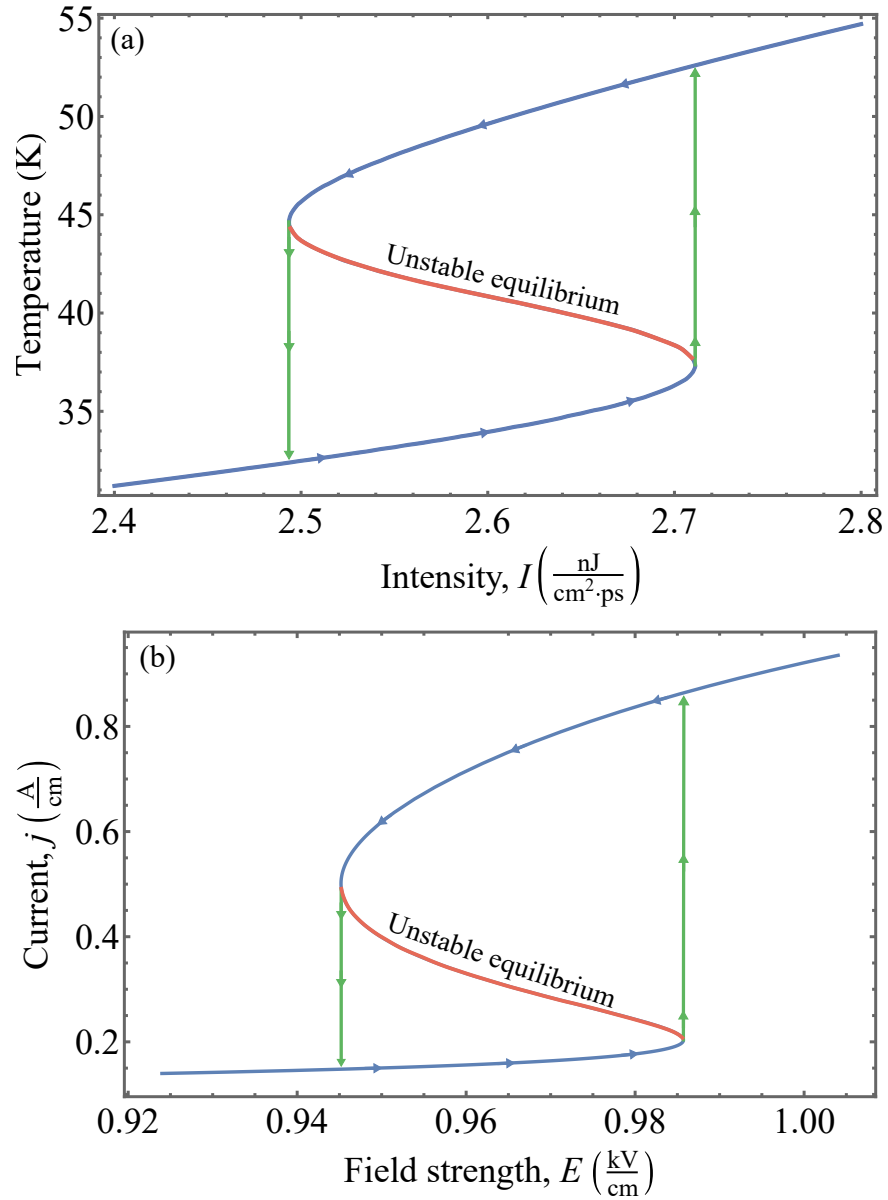


Рис. 13: (a) Зависимость температуры электронного газа от интенсивности разогрева I . (b) Зависимость электрического тока j от напряжённости электромагнитного поля E , приложенного к образцу. Стрелки показывают направления движения по петле гистерезиса. Параметры расчёта: $M_e = 0.5M_0$, $M_X = 2M_e$, $M_T = 3M_e$, $\tau_{e,tr} = 2$ пс, $\tau_{e,LA} = 30$ пс, $r_D = 0$, $r_{LA} = 10$, $D_e^{(0)} = D_h^{(0)} = D_T^{(0)} = 5.2 \cdot 10^8$ эВ·см⁻¹, $D_X^{(0)} = 0$, $\rho = 4.46 \cdot 10^{-7}$ г·см⁻², $E_T = 25$ мэВ, $\hbar\omega_O = 30.3$ мэВ [55], остальные параметры такие же, как на рис. 12.

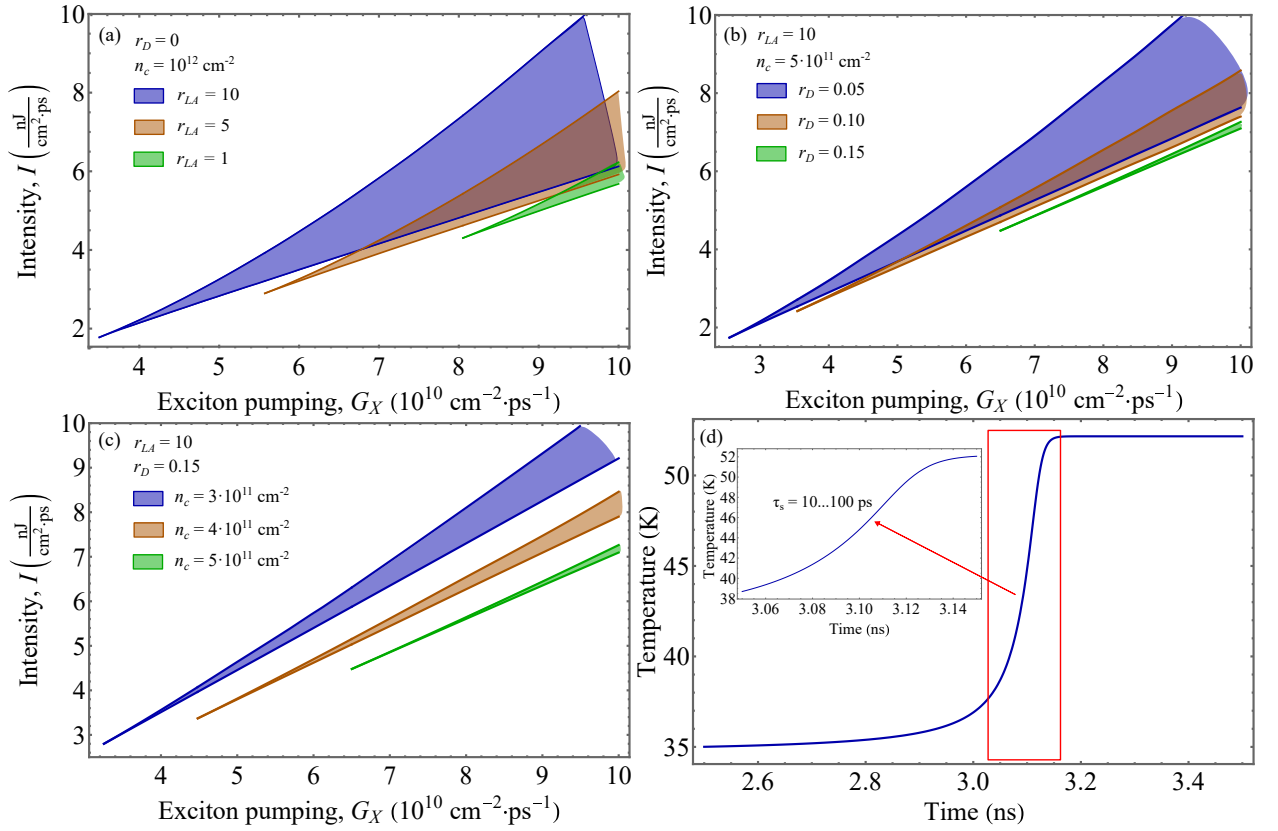


Рис. 14: (a) Область бифуркации на диаграмме (G_X, I) для различных значений r_{LA} , при $r_D = 0$ и $n_c = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. (b) То же самое для различных значений r_D , при $r_{LA} = 10$ и $n_c = 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (c) То же самое для различных значений n_c , при $r_D = 0,15$ и $r_{LA} = 10$. (d) Временная эволюция температуры, соответствующая правой вертикальной линии на рис. 13, с начальным отклонением от равновесия 0,1 К.

Характерное время переключения составляет $\tau_s \sim 10 \dots 100 \text{ пс}$.

6.4 Время переключения

Процесс переключения, соответствующий зелёным вертикальным линиям на рис. 13 (и пунктирным зелёным линиям на рис. 15), включает в себя изменения как температуры, так и отношения плотности электронов к плотности трионов. Здесь под временем переключения мы подразумеваем характерное время, которое система проводит в неравновесном и нестационарном состоянии, а не характерное время выхода из равновесия или его последующего установления (которое определяет „хвосты“ на рис. 14(d) и будет обсуждаться далее). Для $n_X \sim n_c \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ характерное время переключения τ_s составляет порядка десятков-сотен пикосекунд, как показано на рис. 14(d). Качественно, процесс переключения можно разделить на процессы конверсии и нагрева. Характерное время процессов конверсии τ_C можно выразить как величину, обратную темпу захвата-ионизации на электрон:

$$\tau_C \sim \frac{1}{\gamma n_X} \sim \frac{1}{\beta n_T}. \quad (49)$$

Здесь скорость образования трионов γn_X имеет тот же порядок величины, что и скорость ударной диссоциации βn_T . Это справедливо для не слишком низких температур и следует из уравнений (39) (а–с) в стационарном случае. С увеличением плотности экситонов характерное время конверсии уменьшается, что можно объяснить усилением нелинейных членов, приводящих к более быстрой динамике в системе. Характерное

время нагрева τ_H выражается как:

$$\tau_H \sim \frac{k_B(n_c + n_X) \times \Delta T}{\frac{4\pi}{c} I \times \frac{n_c e^2 \tau_{e,tr}}{M_e}}, \quad (50)$$

где ΔT — разница температур между высокотемпературной и низкотемпературной ветвями; для оценки мы также рассчитывали теплоёмкость в больцмановском пределе. Эффективное время охлаждения τ_{LA}^* обусловлено процессами испускания продольных акустических фононов, с поправкой на вклад нелинейных процессов в Q_I , которые делают его несколько меньше в областях высоких температур. В пределе $n_c \ll n_X$ динамика переключения асимметрична: переключение с повышением температуры, т.е. из состояния с более низкой температурой в состояние с более высокой температурой, происходит заметно быстрее ($\tau_s \sim 10$ пс), чем с понижением температуры ($\tau_s \lesssim 100$ пс). Эта асимметрия возникает из-за экспоненциально активированных процессов охлаждения Q_O и Q_I , показанных на рис. 15. Время разогрева $\tau_H \sim \Delta T/I$ сильно зависит от этих экспоненциальных процессов, поскольку они существенно ограничивают рост разности температур ΔT с увеличением интенсивности I . Одновременно они лишь незначительно изменяют эффективное время охлаждения τ_{LA}^* в процессе с понижением температуры из-за их меньшей значимости в этом диапазоне, что отчётливо видно на рис. 15. Таким образом, поскольку увеличение плотности экситонов n_X приводит к бóльшим необходимым интенсивностям разогрева, это, следовательно, уменьшает как τ_H (τ_{LA}^*), так и общее время переключения $\tau_s = \tau_C + \tau_H$ (τ_{LA}^*).

Что касается „хвостов“, то отклонение от равновесия (левый хвост на рис. 14(d)) всегда происходит медленнее, чем его последующее установление (правый „хвост“ на рис. 14(d)). Это обстоятельство можно описать следующим образом: пусть изменение температуры во времени вблизи равновесной температуры задаётся формулой:

$$\frac{d\delta T}{dt} = a\delta T + b(\delta T)^2, \quad (51)$$

где δT обозначает отклонение температуры от равновесной. Здесь устойчивое равновесие соответствует $a < 0$, а неустойчивое — $a > 0$. Поскольку на границах (зелёные вертикальные линии) петли гистерезиса (см. рис. 13), где начинается переключение между ветвями, сходятся линия устойчивого решения (синяя линия) и неустойчивого (красная линия) равновесия, эта точка соответствует $a = 0$ (при $b > 0$ для правой границы и $b < 0$ для левой). Таким образом, время выхода из равновесия описывается зависимостью $\sim (\delta T)^{-1}$, тогда как время его последующего установления значительно более слабой зависимостью $\sim \ln(\delta T)$.

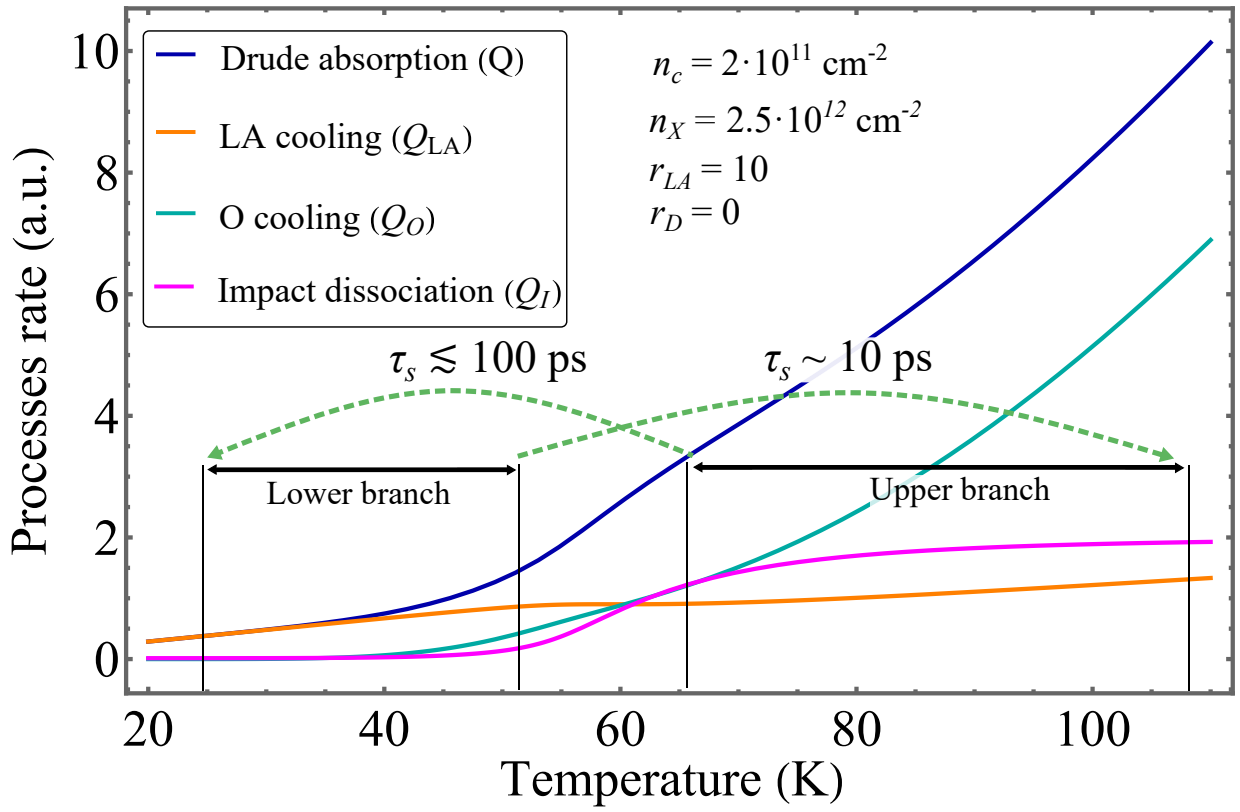


Рис. 15: Зависимость мощности процессов разогрева и охлаждения (в условных единицах) от температуры электронного газа (K). Чёрные стрелки соответствуют областям температуры, в которых реализуется бистабильность. Зелёные пунктирные линии (с указанными над ними характерными временами переключения) соответствуют процессам переключения между ветвями на границе гистерезиса, обозначенным вертикальными зелёными линиями на рис. 13. Параметры расчёта: $n_c = 2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $G_X = 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}\text{пс}^{-1}$, $r_{LA} = 10$, $r_D = 0$, $D_X^{(0)} = 5.2 \cdot 10^7 \text{ эВ}\cdot\text{см}^{-1}$; остальные параметры такие же, как на рис. 12 и 13.

7 Заключение

В данной работе развит многочастичный подход для описания переходов между трионными (притягивающий ферми-полярон) и экситонными (отталкивающий ферми-полярон) состояниями под действием электромагнитного поля терагерцового диапазона. Показано, что прямой переход с поглощением терагерцового фотона имеет порог при энергии связи ферми-полярона, а его темп характеризуется вблизи порога частотной зависимостью $(\hbar\omega - |E_{FP}|)^{3/2}$, обусловленной электрон-экситонными корреляциями в конечном состоянии. Кроме того, продемонстрировано, что спектральное уширение, вызванное рассеянием на статических дефектах и фононах, приводит к размытию порога и подавлению многочастичных корреляций.

Поскольку в экспериментах используются мощные пикосекундные терагерцовые импульсы, также рассмотрен косвенный механизм — ударная диссоциация трионов при столкновениях с „горячими“ электронами, энергия которых в результате сопутствующего разогрева системы может достигать значений, сравнимых с энергией связи ферми-полярона. Этот косвенный механизм обладает экспоненциальной (активационной) температурной зависимостью. При разогреве системы до температуры порядка 50 К вклад ударной диссоциации сравнивается по порядку величины со вкладом диссоциации за счёт прямого поглощения терагерцового кванта.

В последней части работы изучено нелинейное поведение системы кулоновских комплексов (электрон – экситон – трион). Обнаружено, что ударная диссоциация трионов, ввиду экспоненциальной зависимости от температуры сталкивающихся частиц, приводит к практически ступенчатой зависимости стационарных концентраций электронов и трионов от температуры системы. Это обстоятельство, наряду с более низкой проводимостью тяжёлых трионов по сравнению со свободными электронами, обуславливает бистабильность температуры системы при её разогреве электромагнитным полем.

Список литературы

- [1] Twenty years of 2D materials // *Nat.* — 2024. — Vol. 20. [10.1038/s41567-023-02381-0](https://doi.org/10.1038/s41567-023-02381-0).
- [2] Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films / K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov et al. // *Sci.* — 2004. — Vol. 336. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>.
- [3] Two-dimensional atomic crystals / K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin et al. // *PNAS.* — 2005. — Vol. 102, no. 30. — Pp. 10451–10453. <https://doi.org/10.1073/pnas.0502848102>.
- [4] Atomically thin MoS₂: a new direct-gap semiconductor / Kin Fai Mak, Changgu Lee, James Hone et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Vol. 105, no. 13. — P. 136805. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.136805>.
- [5] Emerging photoluminescence in monolayer MoS₂ / Andrea Splendiani, Liang Sun, Yuanbo Zhang et al. // *Nano Lett.* — 2010. — Vol. 10, no. 4. — Pp. 1271–1275. <https://doi.org/10.1021/nl903868w>.
- [6] Келдыш, Л. В. Кулоновское взаимодействие в тонких пленках полупроводников и полуметаллов / Л. В. Келдыш // *Письма в ЖЭТФ.* — 1979. — Vol. 29. — P. 716. http://jetpletters.ru/ps/0/article_6696.shtml.
- [7] Durnev, M. V. Excitons and trions in two-dimensional semiconductors based on transition metal dichalcogenides / M. V. Durnev, M. M. Glazov // *Phys. Usp.* — 2018. — Vol. 61, no. 9. — P. 825–845. <https://ufn.ru/en/articles/2018/9/a/>.
- [8] Ivchenko, Eougenious L. Optical spectroscopy of semiconductor nanostructures / Eougenious L Ivchenko. — Alpha Science, Harrow, 2005.
- [9] Semina, M. A. Localized excitons and trions in semiconductor nanosystems / M. A. Semina, R. A. Suris // *Phys. Usp.* — 2022. — Vol. 65. — Pp. 111–130. <https://doi.org/10.3367/ufne.2020.11.038867>.
- [10] Tightly bound trions in monolayer MoS₂ / Kin Fai Mak, Keliang He, Changgu Lee et al. // *Nat. Mater.* — 2013. — 03. — Vol. 12, no. 3. — Pp. 207–211. <http://dx.doi.org/10.1038/nmat3505>.
- [11] Charged excitons in monolayer WSe₂: Experiment and theory / Emmanuel Courtade, M Semina, Marco Manca et al. // *Phys. Rev. B.* — 2017. — Vol. 96, no. 8. — P. 085302. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.085302>.
- [12] Ganichev, Sergey. Intense terahertz excitation of semiconductors / Sergey Ganichev, Willi Prettl. — OUP Oxford, 2005. — Vol. 14. <https://books.google.de/books?id=95EUDAAAQBAJ>.
- [13] THz spectroscopy for fundamental science and applications / Jean-Francois Lampin, Gaël Mouret, Sukhdeep Dhillon, Juliette Mangeney // *Photoniques.* — 2020. — no. 101. — Pp. 33–38. <https://doi.org/10.1051/photon/202010133>.
- [14] Nonlinear optical physics at terahertz frequency / Yao Lu, Yibo Huang, Junkai Cheng et al. // *Nanophotonics.* — 2024. — Vol. 13, no. 18. — Pp. 3279–3298.
- [15] The elbe infrared and thz facility at helmholtz-zentrum dresden-rossendorf / Manfred Helm, Stephan Winnerl, A Pashkin et al. // *Eur. Phys. J. Plus.* — 2023. — Vol. 138, no. 2. — P. 158.

- [16] Terahertz coherent control of optically dark paraexcitons in Cu₂O / Silvan Leinß, Tobias Kampfrath, K v. Volkman et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101, no. 24. — P. 246401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.246401>.
- [17] Ultrafast switching of trions in 2D materials by terahertz photons / Tommaso Venanzi, Marzia Cuccu, Raul Perea-Causin et al. // *Nat. Photonics*. — 2024. — Vol. 18, no. 12. — Pp. 1344–1349. <https://doi.org/10.1038/s41566-024-01512-0>.
- [18] Ossau, Wolfgang J. Optical properties of 2D systems with interacting electrons / Wolfgang J Ossau, Robert Suris. — Springer Science & Business Media, 2012. — Vol. 119.
- [19] Suris tetrons: possible spectroscopic evidence for four-particle optical excitations of a two-dimensional electron gas / AV Koudinov, C Kehl, AV Rodina et al. // *Physical Review Letters*. — 2014. — Vol. 112, no. 14. — P. 147402.
- [20] Negatively charged polaritons in a semiconductor microcavity / Ronen Rapaport, E. Cohen, Arza Ron et al. // *Phys. Rev. B*. — 2001. — May. — Vol. 63. — P. 235310. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.235310>.
- [21] Efimkin, Dmitry K. Many-body theory of trion absorption features in two-dimensional semiconductors / Dmitry K. Efimkin, Allan H. MacDonald // *Phys. Rev. B*. — 2017. — Jan. — Vol. 95. — P. 035417. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.035417>.
- [22] Glazov, M. M. Optical properties of charged excitons in two-dimensional semiconductors / M. M. Glazov // *J. Chem. Phys.* — 2020. — Vol. 153, no. 3. — P. 034703. <https://doi.org/10.1063/5.0012475>.
- [23] Electron recoil effect in electrically tunable MoSe₂ monolayers / Jonas Zipfel, Koloman Wagner, Marina A. Semina et al. // *Phys. Rev. B*. — 2022. — Feb. — Vol. 105. — P. 075311. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.105.075311>.
- [24] Iakovlev, Z. A. Fermi polaron fine structure in strained van der Waals heterostructures / Z. A. Iakovlev, M. M. Glazov // *2D Materials*. — 2023. — Vol. 10, no. 3. — P. 035034.
- [25] Iakovlev, Z. A. Longitudinal-transverse splitting and fine structure of Fermi polarons in two-dimensional semiconductors / Z. A. Iakovlev, M. M. Glazov // *Journal of Luminescence*. — 2024. — Vol. 273. — P. 120700.
- [26] Yagodkin, Denis. Excitons under large pseudomagnetic fields. — 2024. <https://arxiv.org/abs/2412.16596>.
- [27] Shentsev, A. M. Terahertz radiation induced attractive-repulsive Fermi polaron conversion in transition metal dichalcogenide monolayers / A. M. Shentsev, M. M. Glazov // *Phys. Rev. B*. — 2026. — Mar. — Vol. 113. — P. 125307. <https://link.aps.org/doi/10.1103/m6dj-rgbz>.
- [28] Shentsev, AM. Bistability of electron temperature in atomically thin semiconductors in the presence of exciton photogeneration / AM Shentsev // *arXiv preprint arXiv:2603.07139*. — 2026. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2603.07139>.
- [29] Excitons and Trions Modified by Interaction with a Two-Dimensional Electron Gas / Robert A Suris, Vladimir P Kochereshko, Georgy V Astakhov et al. // *physica status solidi (b)*. — 2001. — Vol. 227, no. 2. — Pp. 343–352. [https://doi.org/10.1002/1521-3951\(200110\)227:2<343::AID-PSSB343>3.0.CO;2-W](https://doi.org/10.1002/1521-3951(200110)227:2<343::AID-PSSB343>3.0.CO;2-W).

- [30] Optical Properties of 2D Systems with Interacting Electrons / Ed. by W. Ossau, R. Suris. — NATO ASI, 2003.
- [31] Theory of exciton-electron scattering in atomically thin semiconductors / Christian Fey, Peter Schmelcher, Atac Imamoglu, Richard Schmidt // *Phys. Rev. B*. — 2020. — Vol. 101, no. 19. — P. 195417. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.195417>.
- [32] Naftaly, Mira. Hexagonal boron nitride studied by terahertz time-domain spectroscopy / Mira Naftaly, Jon Leist, Richard Dudley // *Journal of Physics: Conference Series*. — Vol. 310. — 2011. — P. 012006. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/310/1/012006>.
- [33] Diffusion of excitons in a two-dimensional fermi sea of free charges / Koloman Wagner, Zakhar A Iakovlev, Jonas D Ziegler et al. // *Nano Letters*. — 2023. — Vol. 23, no. 11. — Pp. 4708–4715. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.2c03796>.
- [34] Crossover from exciton polarons to trions in doped two-dimensional semiconductors at finite temperature / Antonio Tienne, Brendan C Mulkerin, Jesper Levinsen et al. // *Physical Review B*. — 2023. — Vol. 108, no. 12. — P. 125406. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.125406>.
- [35] Terahertz-induced energy transfer from hot carriers to trions in a MoSe₂ monolayer / Tommaso Venanzi, Malte Selig, Stephan Winnerl et al. // *ACS Photonics*. — 2021. — Vol. 8, no. 10. — Pp. 2931–2939. <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.1c00394>.
- [36] Budkin, GV. Heating and cooling of a two-dimensional electron gas by terahertz radiation / GV Budkin, SA Tarasenko // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2011. — Vol. 112, no. 4. — Pp. 656–663. <https://doi.org/10.1134/S1063776111030046>.
- [37] Kaasbjerg, Kristen. Phonon-limited mobility in n-type single-layer MoS₂ from first principles / Kristen Kaasbjerg, Kristian S Thygesen, Karsten W Jacobsen // *Phys. Rev. B*. — 2012. — Vol. 85, no. 11. — P. 115317. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.115317>.
- [38] Kaasbjerg, Kristen. Acoustic phonon limited mobility in two-dimensional semiconductors: Deformation potential and piezoelectric scattering in monolayer MoS₂ from first principles / Kristen Kaasbjerg, Kristian S Thygesen, Antti-Pekka Jauho // *Physical Review B*. — 2013. — Vol. 87, no. 23. — P. 235312.
- [39] Kaasbjerg, Kristen. Hot-electron cooling by acoustic and optical phonons in monolayers of MoS₂ and other transition-metal dichalcogenides / Kristen Kaasbjerg, KS Bhargavi, SS Kubakaddi // *Phys. Rev. B*. — 2014. — Vol. 90, no. 16. — P. 165436. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.165436>.
- [40] Intrinsic transport properties of electrons and holes in monolayer transition-metal dichalcogenides / Zhenghe Jin, Xiaodong Li, Jeffrey T. Mullen, Ki Wook Kim // *Phys. Rev. B*. — 2014. — Jul. — Vol. 90. — P. 045422. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.045422>.
- [41] Gantmakher, VF. Carrier scattering in metals and semiconductors / VF Gantmakher, YB Levinson. — Elsevier, 2012. — Vol. 19.
- [42] Glazov, MM. Quantum interference effect on exciton transport in monolayer semiconductors / MM Glazov // *Physical Review Letters*. — 2020. — Vol. 124, no. 16. — P. 166802.

- [43] Microwave modulation of circularly polarized exciton photoluminescence in GaAs/AlAs multiple quantum wells / Z Chen-Esterlit, E Lifshitz, E Cohen, LN Pfeiffer // *Physical Review B*. — 1996. — Vol. 53, no. 16. — P. 10921. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.10921>.
- [44] Lifshitz, E. Microwave modulated and thermal modulated photoluminescence studies of 2H-lead iodide / E Lifshitz, L Bykov // *The Journal of Physical Chemistry*. — 1993. — Vol. 97, no. 37. — Pp. 9288–9292. <https://doi.org/10.1021/j100139a006>.
- [45] Golub, LE. Interaction of free carriers with localized excitons in quantum wells / LE Golub, EL Ivchenko, SA Tarasenko // *Solid state communications*. — 1998. — Vol. 108, no. 10. — Pp. 799–802. [https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(98\)00302-0](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(98)00302-0).
- [46] Ashkinadze, BM. Optical and Electrical Bistability Induced by Exciton Ionization Processes / BM Ashkinadze, VV Belkov, AV Subashiev // *physica status solidi (b)*. — 1988. — Vol. 150, no. 2. — Pp. 533–537. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/pssb.2221500229>.
- [47] Braunstein, Rubin. Nonlinear optical effects / Rubin Braunstein // *Phys. Rev.* — 1962. — Vol. 125, no. 2. — P. 475. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.125.475>.
- [48] Exciton formation in two-dimensional semiconductors / Konstantinos Mourzidis, Vishwas Jindal, Mikhail Glazov et al. // *Phys. Rev. X*. — 2025. — Vol. 15, no. 3. — P. 031078. <https://doi.org/10.1103/66rj-jbqw>.
- [49] Ashkinadze, BM. Self-oscillations in an exciton-electron system with impact ionization of excitons / BM Ashkinadze, AV Subashiev // *JETP Lett.* — 1987. — Vol. 46. — P. 357. http://jetpletters.ru/ps/0/article_18585.shtml.
- [50] Optical bistability in semiconductors / HM Gibbs, SL McCall, TNC Venkatesan et al. // *Applied Physics Letters*. — 1979. — Vol. 35, no. 6. — Pp. 451–453. <https://doi.org/10.1063/1.91157>.
- [51] Bistability in atomic-scale antiferromagnets / Sebastian Loth, Susanne Baumann, Christopher P Lutz et al. // *Science*. — 2012. — Vol. 335, no. 6065. — Pp. 196–199.
- [52] Chen, Pai-Yen. Bistable and Self-Tunable Negative-Index Metamaterial at Optical Frequencies / Pai-Yen Chen, Mohamed Farhat, Andrea Alù // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — Mar. — Vol. 106. — P. 105503. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.105503>.
- [53] Valley polarization fluctuations, bistability, and switching in two-dimensional semiconductors / MA Semina, MM Glazov, C Robert et al. // *Phys. Rev. B*. — 2022. — Vol. 106, no. 3. — P. 035302. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.035302>.
- [54] Exciton diffusion in monolayer semiconductors with suppressed disorder / Jonas Zipfel, Marvin Kulig, Raúl Perea-Causín et al. // *Physical Review B*. — 2020. — Vol. 101, no. 11. — P. 115430. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.115430>.
- [55] Phonon-assisted exciton/trion conversion efficiency in transition metal dichalcogenides / Sabrine Ayari, Sihem Jaziri, Robson Ferreira, Gerald Bastard // *Physical Review B*. — 2020. — Vol. 102, no. 12. — P. 125410. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.125410>.

- [56] *Palummo, Maurizia*. Exciton radiative lifetimes in two-dimensional transition metal dichalcogenides / Maurizia Palummo, Marco Bernardi, Jeffrey C Grossman // *Nano Lett.* — 2015. — Vol. 15, no. 5. — Pp. 2794–2800. <https://doi.org/10.1021/nl503799t>.
- [57] Diffusion of excitons in a two-dimensional fermi sea of free charges / Koloman Wagner, Zakhar A Iakovlev, Jonas D Ziegler et al. // *Nano Letters*. — 2023. — Vol. 23, no. 11. — Pp. 4708–4715. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.2c03796>.

А Дополнительные материалы к разделу «Бистабильность разогрева»

А.1 Режим низкой электронной плотности

Как было показано ранее, бистабильность более выражена в режиме низких плотностей резидентных носителей заряда $n_c \ll n_X$ (см. рис. 14(с)). В данном режиме равновесная электронная плотность выражается как:

$$n_e = \begin{cases} \frac{n_c}{1+\gamma\tau_T n_X} & \text{при } \beta \ll \gamma n_X/n_c, \\ n_c - \frac{\gamma n_X}{\beta} & \text{при } \beta \gg \gamma n_X/n_c, \end{cases} \quad (52)$$

где мы считаем плотность экситонов постоянной, т.е. $n_X = G_X\tau_X - \tau_X n_T/\tau_T \approx G_X\tau_X$. Температура нижней (L) ветви имеет вид:

$$T_L = T_l + E^2 \times \theta_L \left(\frac{1-r_D}{1+\gamma\tau_T n_X} + r_D \right), \quad (53)$$

с параметром θ_L , который определяется характерными параметрами системы:

$$\theta_L = \left(\frac{k_B n_X}{\tau_{X,LA}} + \frac{r_{LA} k_B n_c}{\tau_{e,LA}} \times \frac{\gamma\tau_T n_X}{1+\gamma\tau_T n_X} \right)^{-1} \times \frac{e^2 n_c \tau_{e,tr}}{M_e}. \quad (54)$$

Здесь мы пренебрегаем вкладом в охлаждение от ударной диссоциации Q_I и испусканием оптических фононов Q_O . Это приближение обосновано при низких температурах, так как рассматриваемые плотности резидентных зарядов малы $n_c \ll n_X$ ($Q_I \sim n_c^2$), а деформационный потенциал, ответственный за взаимодействие экситонов с оптическими фононами, мал в ДПМ монослоях (см. раздел 6.2). В то же время мы не можем пренебрегать вкладом трионов в Q_{LA} , потому что $r_{LA} n_c$ и n_X могут быть одного порядка при большом контрасте в охлаждении r_{LA} . Если пренебречь вкладом оптических фононов также и при высоких температурах, то температура верхней (U) ветви выражается как

$$T_U = T_l + E^2 \times \theta_U \left(1 - (1-r_D) \frac{\gamma n_X}{\beta(T_U) n_c} \right), \quad (55)$$

с параметром θ_U :

$$\theta_U = \frac{\tau_{X,LA}}{k_B n_X} \times \frac{e^2 n_c \tau_{e,tr}}{M_e}. \quad (56)$$

При таком подходе разность между температурами верхней и нижней ветвей $T_U - T_L \sim \theta_U \times E^2$, а время переключения симметрично (для процессов с повышением и понижением температуры) и определяется временем охлаждения экситонов на продольных акустических фононах τ_{LA}^X . В действительности, как было показано в предыдущем разделе 6.4, это не так. Как видно на рис. 15, даже при $n_X/n_c = 12.5$, температурная релаксация электронов и трионов на оптических фононах вносит определяющий вклад в охлаждение системы на верхней ветви, и эти вклады определяют верхнюю температуру и не могут быть исключены из анализа при её определении. Можно также заметить, что вклад от охлаждения на продольных акустических фононах Q_{LA} (оранжевая линия на рис. 15) может быть немонотонным, что связано с диссоциацией более быстро охлаждающихся трионов. Помимо этого, вклад в охлаждение от ударной диссоциации трионов Q_I (розовая линия на рис. 15) существенен и при $n_c \sim 10^{11} \text{ см}^{-2}$, но при дальнейшем уменьшении концентрации будет всё менее значителен из-за своей квадратичной пропорциональности $Q_I \sim n_c^2$.

А.2 Время перемешивания температуры

В предыдущих вычислениях мы считали температуру одинаковой для различных компонент системы. Это справедливо, если время релаксации температуры между компонентами системы намного меньше характерного времени динамики системы. Используя золотое правило Ферми, можно вычислить поток энергии из электронной подсистемы в экситонную:

$$C_e \frac{dT_e}{dt} = -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\substack{\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_X \\ \mathbf{k}'_e, \mathbf{k}'_X}} (\varepsilon_{\mathbf{k}_e} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_e}) |M_{\mathbf{k}_e, \mathbf{k}'_e}|^2 \delta_{\mathbf{k}_e + \mathbf{k}_X, \mathbf{k}'_e + \mathbf{k}'_X} \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_e} + \varepsilon_{\mathbf{k}_X} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_e} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_X}) f_{\mathbf{k}_e} (1 - f_{\mathbf{k}_e}) f_{\mathbf{k}_X} (1 + f_{\mathbf{k}'_X}). \quad (57)$$

Здесь $M_{\mathbf{k}_e, \mathbf{k}'_e}$ – матричный элемент рассеяния электрона на экситоне, C_e – теплоёмкость электронной подсистемы, $f_{\mathbf{k}_e}$ – функция распределения Ферми-Дирака для электронной подсистемы, $f_{\mathbf{k}_X}$ – функция распределения Бозе-Эйнштейна для экситонной подсистемы. Выражение в правой части уравнения (57) удобнее вычислять в системе центра масс сталкивающихся частиц. Далее мы примем распределения и теплоёмкость больцмановскими, а также будем использовать короткодействующее приближение для взаимодействия из раздела 2.1:

$$\frac{dT_e}{dt} = -\frac{2n_X}{\hbar^3} \frac{\mu^2 V_0^2}{M_T} (T_e - T_X), \quad (58)$$

где $V_0 = -\frac{2\pi\hbar^2}{\mu} \ln^{-1}(E_X/E_T)$ – соответствующая константа в короткодействующем приближении [30] (т.е. $V(\mathbf{r}) = V_0 \delta(\mathbf{r})$). Таким образом, вычисления показывают, что характерное время смешивания температур между подсистемами:

$$\tau_{mix} = \left(\frac{8\pi^2 \hbar n_X}{M_T \ln^2(E_X/E_T)} \right)^{-1} \sim 0.1 \text{ пс}. \quad (59)$$

Здесь мы считали плотность экситонной компоненты $n_x \sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Это время соотносится с характерным временем рассеяния экситонов на электронной подсистеме в работе [57] и более чем на порядок превосходит характерные времена динамики в системе (~ 10 пс).

А.3 Влияние нерезонансной фотогенерации

Если генерация происходит нерезонансным образом, это приводит к дополнительному разогреву системы. Так как этот эффект не зависит от соотношения электронов и трионов, он будет приводить к сужению гистерезисной петли (так как будет уменьшаться необходимая стационарная интенсивность и, как следствие, контраст между электронным и трионным режимами). Обозначим мощность разогрева из-за нерезонансной фотогенерации (см. рис. 16) следующим образом:

$$I_{phg} = \Delta E \times G_X. \quad (60)$$

Здесь нужно более осторожно относиться к величине ΔE , так как это эффективная энергия, передаваемая системе (электронам, экситонам и трионам), а не отстройка от резонанса. По всей видимости, даже при сильной нерезонансной генерации величина разогрева не столь существенна и составляет всего лишь десятки кельвин [17]:

$$T_{phg} = \frac{\Delta E}{k_B} \times \frac{\tau_{X,LA}}{\tau_X} \sim 10 \text{ К}. \quad (61)$$

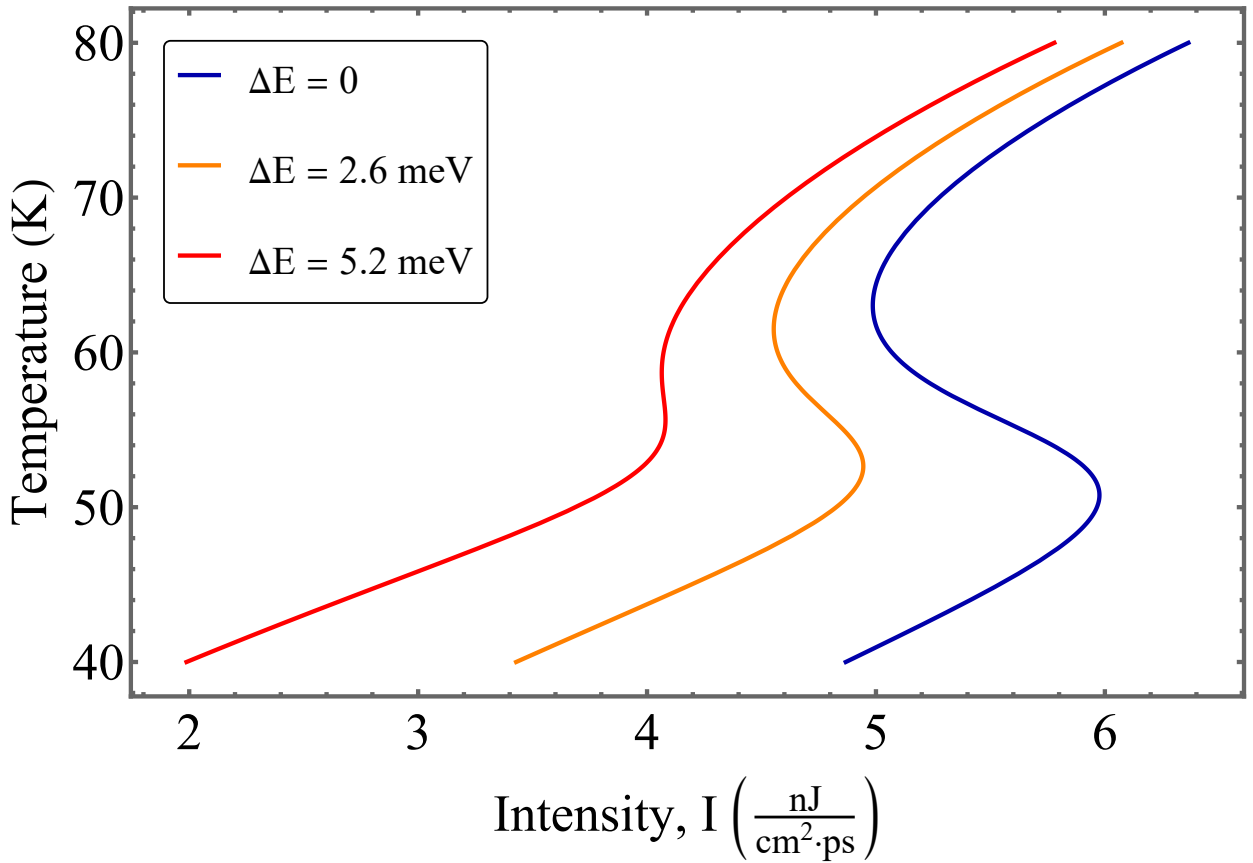


Рис. 16: Зависимость температуры (K) от стационарной интенсивности I низкочастотного поля при разных параметрах разогрева за счёт фотогенерации. Параметры расчёта: $n_c = 2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $G_X = 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2} \text{ пс}^{-1}$, $r_{LA} = 10$, $r_D = 0.1$, $\tau_{e,tr} = 2 \text{ пс}$, $\tau_{e,LA} = 30 \text{ пс}$, $D_e^{(0)} = D_h^{(0)} = D_T^{(0)} = 5.2 \cdot 10^8 \text{ эВ} \cdot \text{см}^{-1}$, $D_X^{(0)} = 5.2 \cdot 10^7 \text{ эВ} \cdot \text{см}^{-1}$, $\gamma = 0.1 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$, $\tau_X = \tau_T = 50 \text{ пс}$.

А.4 Роль экситон-экситонных и трион-трионных столкновений

Помимо электрон-трионных столкновений, которые при достаточной энергии сталкивающихся частиц могут приводить к ударной диссоциации трионов, в систему динамических уравнений 39 также должно быть включено слагаемое, отвечающее за ударную диссоциацию трионов за счёт трион-трионных столкновений:

$$\beta_{TT} \times n_T^2, \quad (62)$$

где множитель β_{TT} аналогичен β в случае ударной диссоциации в результате электрон-трионных столкновений. Однако, как показано на рис. 17, это слагаемое не приводит к качественному изменению поведения системы и лишь в некоторой степени сужает гистерезисную петлю.

Ударная диссоциация за счёт экситон-трионных столкновений незначительна ввиду электронейтральности экситонов. Сравнение темпов диссоциации трионов за счёт экситон-трионных и электрон-трионных столкновений приводит к следующим результатам:

$$\frac{\beta_{TX}}{\beta} \sim \left(\frac{V_0}{e^2/\sqrt{\kappa}} \right)^2 \sim 0.01, \quad (63)$$

где $\kappa \sim \sqrt{M_e E_T / \hbar^2}$ – характерный волновой вектор в процессах ударной диссоциации трионов.

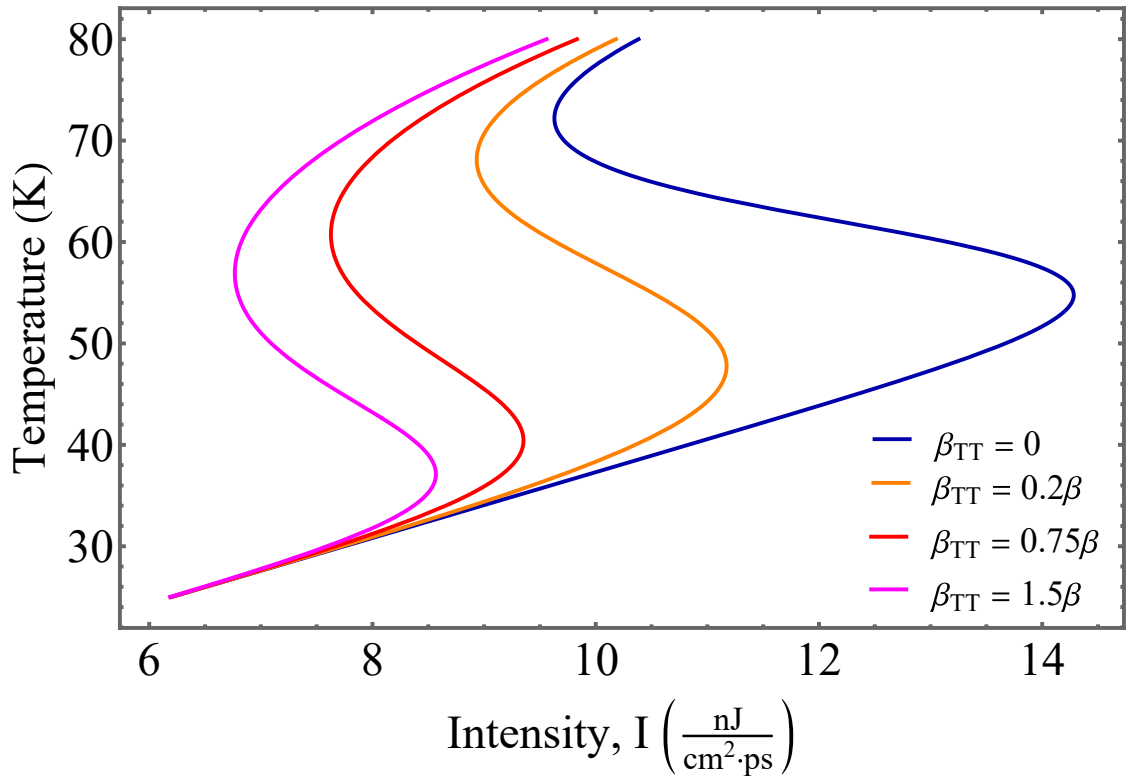


Рис. 17: Зависимость температуры электронного газа от интенсивности низкочастотного поля I для различных параметров трион-трионного столкновения β_{TT} . Параметры расчёта: $n_c = 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $G_X = 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2} \cdot \text{пс}^{-1}$, $r_{LA} = 10$, $r_D = 0.05$, остальные параметры такие же, как на рис. 13.

Экситон-экситонные и экситон-трионные столкновения также приводят к Оже-рекомбинации, тем самым уменьшая время жизни экситонов (τ_X) и трионов (τ_T). При рассматриваемых нами плотностях экситонов $n_X \lesssim 10^{12} \text{ см}^{-2}$ это изменение не столь существенно ($\sim 10\%$) [54].