

К ЗАДАЧЕ О СВЯЗАННОМ СОСТОЯНИИ ЭЛЕКТРОНА И ДЫРКИ В ДИХАЛЬКОГЕНИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

П. А. Крачков^{а*}, И. С. Терехов^{а**}

^а *Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 23 мая 2022 г.,
после переработки 9 сентября 2022 г.
Принята к публикации 10 сентября 2022 г.

Рассмотрены взаимодействующие электрон и дырка в дихалькогенидах переходных металлов. Для исследования взаимодействия было получено уравнение Бете–Солпитера в ведущем порядке по потенциалу взаимодействия. Показано, что поведение потенциала на малых расстояниях существенно влияет на значения энергий связи электрона и дырки. Получено, что разложение уравнения Бете–Солпитера при малой константе связи не содержит сингулярных операторов. Поэтому энергия связи электрона и дырки не содержит параметра регуляризации. Используя теорию возмущений по константе связи, мы аналитически рассчитали энергии основного и первого возбужденного состояний. Для произвольных значений константы связи численно получены энергии связанных состояний электрона и дырки. Также численно найдены критические значения константы связи для кулоновского потенциала и для экспоненциально убывающего потенциала.

DOI: 10.31857/S0044451023020098
EDN: OQSTQJ

1. ВВЕДЕНИЕ

В 2004 г. появилась знаменитая статья [1], посвященная экспериментальному исследованию графена. Статья вызвала всплеск интереса к двумерным и квазидвумерным материалам. Одними из таких материалов являются двумерные дихалькогениды переходных металлов (ДПМ). Эти материалы представляют собой полупроводники, имеющие ширину запрещенной зоны порядка 2 эВ, см., например, [2]. Кроме того, ДПМ — это дираковские материалы, т. е. движение одночастичных возбуждений электронного газа в них описывается двумерным уравнением Дирака. Исследование энергий экситонных состояний (связанных состояний электрона и дырки) для ДПМ является интересной задачей как с экспериментальной, так и с теоретической точек зрения. Сравнение теоретических предсказаний экситонного спектра со спектром, полученным экспериментально, может дать понимание природы электрон-электронного взаимодействия в ДПМ.

Теоретическое исследование взаимодействующих электрона и дырки в материалах представляет собой довольно сложную задачу. Эта сложность связана с нетривиальностью введения взаимодействия в модель. Было много попыток описать взаимодействие электрона и дырки в двумерных ДПМ, см., например, [3–10]. Так, в работе [5] для нахождения гамильтониана, описывающего взаимодействующие электрон и дырку, авторы преобразовали гамильтониан невзаимодействующих электрона и дырки к блочно-диагональному виду. Затем полученный гамильтониан разложили по малому параметру в предположении, что кинетическая энергия много меньше ширины запрещенной зоны. После этого в гамильтониан ввели слагаемое, отвечающее кулоновскому взаимодействию. В работе [3] для нахождения спектра экситонов и исследования критического поведения системы рассматривается двумерное модифицированное уравнение Дирака для частицы в кулоновском поле. В работах [4, 6] гамильтониан системы был выбран в виде суммы трех слагаемых. Первое второе и третье слагаемые являются кинетической энергией частицы с приведенной массой, потенциалом взаимодействия и слагаемым, связанным с кривизной Берри, соответственно. Также в рабо-

* E-mail: p.a.krachkov@inp.nsk.su

** E-mail: i.s.terekhov@inp.nsk.su

те [4] для описания системы обсуждались еще два уравнения. Первое — уравнение Шредингера для двух взаимодействующих дираковских частиц с гамильтонианом, разложенным по малому параметру отношения энергии связи к ширине запрещенной зоны. Второе уравнение является некоторой модификацией уравнения Бете–Солпитера. В работе [9] рассматривается уравнение Шредингера для двух взаимодействующих дираковских частиц. Авторы получили разложение этого уравнения по малой константе связи в ведущем и следующем за ведущим порядке. Результат разложения совпал с уравнением, полученным в [4]. Было обнаружено, что при разложении гамильтониана возникают неинтегрируемые сингулярные операторы. Поэтому для вычисления поправок по константе связи к энергиям экситона необходимо ввести некоторый параметр регуляризации [9]. Таким образом, поправки зависят от параметра регуляризации. Зависимость энергий связи от внешних параметров выглядит необычно, поэтому необходимо дальнейшее изучение взаимодействующих электрона и дырки. Различные подходы к задаче показывают сложность добавления в систему взаимодействия между электронами.

Эта сложность связана с тем, что задача о взаимодействии электрона и дырки в дихалькогенидах не является двухчастичной, поскольку существуют электроны под поверхностью Ферми, которые приводят к появлению электрон-дырочных возбуждений в промежуточных состояниях. Аналогичные задачи рассматривались в рамках квантовой теории поля, см., например, [11, 12]. Уравнение, описывающее связанные состояния электрона и дырки, — это уравнение Бете–Солпитера (УБС). Поэтому для нахождения экситонного спектра необходимо получить УБС для системы взаимодействующих электрона и дырки. УБС для полупроводников было получено в работе [13]. УБС для двумерных ДПМ рассматривалось в работах [8, 10]. В работе [8] авторы численно решили УБС и нашли спектр экситонов. При получении спектра учитывались как приближенные случайных фаз для потенциала, так и поправки, связанные с оператором собственной энергии. Однако одночастичная функция Грина, используемая в работе [8], соответствует частице с параболической зависимостью энергии от импульса, тогда как в ДПМ одночастичные возбуждения описываются двумерным уравнением Дирака и имеют другой закон дисперсии. Приближение для функции Грина, используемое в работе [8], означает малость кинетической энергии частицы по сравнению с шириной

запрещенной зоны. Однако величины кинетической энергии и энергии взаимодействия для электронов в ДПМ имеют порядок ширины запрещенной зоны, поэтому такое приближение для функции Грина некорректно.

В настоящей работе мы получаем УБС для системы взаимодействующих электрона и дырки в двумерных ДПМ в ведущем порядке по потенциалу взаимодействия. Мы исследуем решения полученного уравнения для разных значений константы связи и для разных типов потенциалов. Для кулоновского потенциала мы находим аналог нерелятивистского приближения для УБС, который можно использовать в случае малой константы связи. Найденное уравнение отличается от полученного в работах [4, 9] и не содержит неинтегрируемых операторов, поэтому поправка к энергии экситона не зависит от параметра регуляризации. Мы также находим численно критическое значение константы связи, т. е. значение константы связи, при котором энергия основного состояния экситона достигает валентной зоны. Для исследования поведения решений вблизи критических значений константы связи мы рассмотрели локализованный потенциал, не содержащий особенностей.

Статья имеет следующую структуру: в разд. 2 мы описываем модель, получаем УБС для электрона и дырки; в разд. 3 рассматриваем разложение УБС при малой константе связи и показываем, что стандартный метод разложения УБС в случае кулоновского потенциала приводит к появлению неинтегрируемых поправок к потенциалу взаимодействия. В разд. 3.1 находим правильное разложение УБС в случае кулоновского потенциала взаимодействия. В разд. 4 представлено точное численное решение для УБС. В этой же главе мы сравниваем точное решение и решение, полученное с помощью теории возмущений. Также мы находим критические значения констант связи. В Заключение обсуждаются полученные результаты.

2. МОДЕЛЬ

Стартовой точкой нашего рассмотрения является гамильтониан, описывающий спектр одночастичных возбуждений в двумерных ДПМ [14]:

$$\hat{H}_\lambda = v_0 (\tau \hat{p}_x \sigma^x + \hat{p}_y \sigma^y) + \frac{\Delta}{2} \sigma^z - \lambda \tau \frac{\sigma^z - 1}{2} s_z, \quad (1)$$

где $(\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ — матрицы Паули, отвечающие псевдоспиновой степени свободы, $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y)$ — оператор импульса, s_z — матрица Паули, отвечающая

спиновой степени свободы, $\tau = \pm 1$ — индекс, отвечающий долине, λ — параметр спин-орбитального взаимодействия, Δ — ширина запрещенной зоны. В уравнении (1) мы ввели скорость $v_0 = at/\hbar$, a — постоянная решетки, t — интеграл перекрытия, \hbar — постоянная Планка, см. детали в [14]. Значения параметров Δ , λ , t , и a можно найти в таблице 1 работы [14]. Поскольку $\lambda/\Delta \ll 1$, мы в качестве нулевого приближения положим $\lambda = 0$. Тогда гамильтониан (1) принимает вид

$$\hat{H} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + m\sigma^z, \quad (2)$$

где $m = \Delta/2$ — масса квазичастицы, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y)$. Здесь и далее мы переходим к безразмерным величинам и полагаем $\hbar = v_0 = 1$. Кроме того, мы без потери общности рассматриваем случай $\tau = 1$. Собственные значения E гамильтониана (2) зависят от импульса следующим образом:

$$E(p) = \pm \sqrt{p^2 + m^2}. \quad (3)$$

Отметим, что каждый уровень энергии четырехкратно вырожден, дважды по спиновой степени свободы и дважды по числу долин.

Для нахождения энергетического спектра экситонов необходимо ввести взаимодействие в гамильтониан:

$$(\boldsymbol{\sigma}_e \cdot \hat{\mathbf{p}}_e) + m\sigma_e^z + (\boldsymbol{\sigma}_h \cdot \hat{\mathbf{p}}_h) + m\sigma_h^z, \quad (4)$$

где индексы e и h соответствуют электрону и дырке. В работах [3–7] отправной точкой рассмотрения является разложение гамильтониана невзаимодействующих частиц вблизи энергии электрон-дырочной пары равной $2m$. Затем добавляется потенциал взаимодействия $V(r)$ и некоторые слагаемые, связанные с кривизной Берри, см., например, [4, 6]. Такое рассмотрение аналогично нерелятивистскому разложению в квантовой электродинамике. Хорошо известно, что это разложение справедливо, когда выполняется следующее соотношение: $(2m - E_{exc})/m \ll 1$, где E_{exc} — энергия пары электрон-дырка [11]. Однако для таких материалов, как WS_2 и WSe_2 , энергия связи электрона и дырки порядка m , т.е. $(2m - E_{exc})/m \sim 1$, см. [15, 16]. Это означает, что величина эффективной безразмерной константы связи между квазичастицами порядка единицы. Для такой константы связи аналог нерелятивистского разложения неприменим, поскольку электрон-дырочные возбуждения в промежуточном состоянии могут существенно изменить взаимодействие, см. [11, 12]. Поэтому применимость аналога нерелятивистского разложения для

взаимодействующих электрона и дырки в двумерных ДПМ спорно.

В рамках квантовой электродинамики показано, что УБС описывает связанные состояния электрона и позитрона [11, 12]. Теория электронного газа в полупроводниках аналогична квантовой электродинамике, поэтому для исследования свойств экситонов (связанных состояний электрона и дырки) в полупроводниках необходимо найти и решить УБС [13]. Используя технику, описанную в [12], мы получаем УБС для взаимодействующих электрона и дырки в ведущем порядке по потенциалу взаимодействия:

$$\Psi^{i,j}(\varepsilon_1, \mathbf{p}_1 | \varepsilon_2, \mathbf{p}_2) = -iG_e^{i,n}(\varepsilon_1, \mathbf{p}_1)G_h^{j,l}(\varepsilon_2, \mathbf{p}_2) \times \int \frac{d\mathbf{q} d\omega}{(2\pi)^3} V(\mathbf{q}) \Psi^{n,l}(\varepsilon_1 + \omega, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q} | \varepsilon_2 - \omega, \mathbf{p}_2 - \mathbf{q}), \quad (5)$$

где $V(\mathbf{q})$ — это фурье-образ потенциала электрон-электронного взаимодействия $V(r)$, $G_a^{i,m}(\varepsilon, \mathbf{p})$ — функция Грина частицы, индекс $a = \{e, h\}$ соответствует электрону/дырке, а верхние индексы отвечают матричным элементам сигма-матриц. Функция Грина имеет следующий вид:

$$G_a^{i,m}(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{\varepsilon + (\boldsymbol{\sigma}_a^{i,m} \cdot \mathbf{p}) + m(\sigma_a^z)^{i,m}}{\varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 - m^2 + i0}. \quad (6)$$

Мнимая добавка в знаменателе функции Грина означает, что энергия Ферми расположена в середине запрещенной зоны. Волновая функция Бете–Солпитера Ψ зависит от двух энергий ε_1 и ε_2 , однако волновая функция экситона должна зависеть только от одной энергии (одного времени во временном представлении). Поэтому функция Ψ не может рассматриваться в качестве волновой функции экситона. Эта проблема хорошо изучена [12]. Для получения волновой функции экситона в уравнении (5) мы переходим к новым переменным E и Ω : $\varepsilon_1 = E/2 + \Omega$, $\varepsilon_2 = E/2 - \Omega$. Затем интегрируем по переменной Ω обе части уравнения и получаем

$$\tilde{\psi}(E, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = -i \int \frac{d\Omega}{2\pi} G_e \left(\frac{E}{2} + \Omega, \mathbf{p}_1 \right) \times G_h \left(\frac{E}{2} - \Omega, \mathbf{p}_2 \right) \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} V(\mathbf{q}) \tilde{\psi}(E, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{p}_2 - \mathbf{q}), \quad (7)$$

где введена волновая функция экситона:

$$\tilde{\psi}(E, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \int \frac{d\Omega}{2\pi} \Psi \left(\frac{1}{2}E + \Omega, \mathbf{p}_1 \middle| \frac{1}{2}E - \Omega, \mathbf{p}_2 \right).$$

Здесь и далее мы опускаем индексы, отвечающие элементам сигма-матриц. Ниже мы будем рассматривать экситон с нулевым полным импульсом,

т. е. $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}$. Выполнив интегрирование по переменной Ω в правой части уравнения (7), мы получаем следующее уравнение для волновой функции экситона $\psi(E, \mathbf{p}) = \tilde{\psi}(E, \mathbf{p}, -\mathbf{p})$:

$$(E - (\boldsymbol{\sigma}_e - \boldsymbol{\sigma}_h) \cdot \mathbf{p} - (\sigma_h^z + \sigma_e^z) m) \psi(E, \mathbf{p}) = (\Lambda^{--}(\mathbf{p}) - \Lambda^{++}(\mathbf{p})) \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} V(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) \psi(E, \mathbf{q}), \quad (8)$$

где операторы $\Lambda^{\pm\pm}$ имеют следующий вид:

$$\Lambda^{\pm\pm}(\mathbf{p}) = \Lambda_e^{\pm}(\mathbf{p}) \Lambda_h^{\pm}(-\mathbf{p}), \quad (9)$$

$$\Lambda_a^{\pm}(\mathbf{p}) = \frac{\omega(\mathbf{p}) \pm (\boldsymbol{\sigma}_a \cdot \mathbf{p} + m\sigma_a^z)}{2\omega(\mathbf{p})}, \quad (10)$$

$$\omega(\mathbf{p}) = \sqrt{p^2 + m^2}.$$

Отметим, что уравнение (8) похоже на уравнение Бете – Солпитера для электрон-позитронной пары, полученного в квантовой электродинамике. Это не удивительно, поскольку гамильтониан (2) является двумерным аналогом дираковского гамильтониана электрона. В координатном представлении уравнение (8) имеет вид

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - ((\boldsymbol{\sigma}_e - \boldsymbol{\sigma}_h) \cdot \hat{\mathbf{p}}) - (\sigma_h^z + \sigma_e^z) m \right) \psi(t, \mathbf{r}) = \int d\mathbf{R} [Q^{--}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) - Q^{++}(\mathbf{r} - \mathbf{R})] V(R) \psi(t, \mathbf{R}), \quad (11)$$

где

$$\hat{\mathbf{p}} = -i \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

— оператор импульса, а $Q^{\pm\pm}(\mathbf{r})$ — фурье образ оператора $\Lambda^{\pm\pm}(\mathbf{p})$:

$$Q^{\pm\pm}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \Lambda^{\pm\pm}(\mathbf{p}). \quad (12)$$

Можно показать, что уравнение (11) имеет сохраняющийся ток с плотностью ρ :

$$\rho = \int d\mathbf{r} (|\psi^{++}(t, \mathbf{r})|^2 - |\psi^{--}(t, \mathbf{r})|^2), \quad (13)$$

где

$$\psi^{\pm\pm}(t, \mathbf{r}) = \int d\mathbf{R} Q^{\pm\pm}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \psi(t, \mathbf{R}).$$

В импульсном представлении ρ имеет следующий вид:

$$\rho = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \psi^\dagger(t, \mathbf{p}) [\Lambda^{++}(\mathbf{p}) - \Lambda^{--}(\mathbf{p})] \psi(t, \mathbf{p}), \quad (14)$$

где $\psi^\dagger(t, \mathbf{p})$ — это функция, эрмитово сопряженная к функции $\psi(t, \mathbf{p})$. Плотность ρ может быть отрицательной, поэтому величина ρ не может рассматриваться как плотность вероятности, см. [12].

3. ПРИБЛИЖЕНИЕ МАЛОЙ КОНСТАНТЫ СВЯЗИ

Покажем, что в случае слабого взаимодействия между электроном и дыркой УБС (8) переходит в уравнение Шредингера. Представим функцию $\psi(E, \mathbf{p})$ в следующем виде:

$$\psi(E, \mathbf{p}) = f(\mathbf{p})|1, 1\rangle + h(\mathbf{p})|1, -1\rangle + g(\mathbf{p})|1, 0\rangle + d(\mathbf{p})|0, 0\rangle, \quad (15)$$

где $|\Sigma, \Sigma^z\rangle$ — собственные векторы операторов $(\boldsymbol{\sigma}_e + \boldsymbol{\sigma}_h)^2$ и $(\sigma_e^z + \sigma_h^z)$:

$$(\boldsymbol{\sigma}_e + \boldsymbol{\sigma}_h)^2 |\Sigma, \Sigma^z\rangle = (\Sigma^2 + \Sigma - (\Sigma^z)^2) |\Sigma, \Sigma^z\rangle, \\ (\sigma_e^z + \sigma_h^z) |\Sigma, \Sigma^z\rangle = \Sigma^z |\Sigma, \Sigma^z\rangle.$$

Подставляя функцию $\psi(E, \mathbf{p})$ в виде (15) в уравнение (8), получаем систему уравнений

$$Ef(\mathbf{p}) = 2mf(\mathbf{p}) - \sqrt{2}p^- d(\mathbf{p}) - \frac{m}{\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}f)(\mathbf{p}) + \frac{p^-}{\sqrt{2}\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}d)(\mathbf{p}), \quad (16)$$

$$Eh(\mathbf{p}) = -2mh(\mathbf{p}) + \sqrt{2}p^+ d(\mathbf{p}) + \frac{m}{\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}h)(\mathbf{p}) - \frac{p^+}{\sqrt{2}\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}d)(\mathbf{p}), \quad (17)$$

$$Ed(\mathbf{p}) = \sqrt{2}p^- h(\mathbf{p}) - \sqrt{2}p^+ f(\mathbf{p}) + \frac{p^+}{\sqrt{2}\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}f)(\mathbf{p}) - \frac{p^-}{\sqrt{2}\omega(\mathbf{p})} (\hat{V}h)(\mathbf{p}), \quad (18)$$

$$Eg(\mathbf{p}) = 0, \quad (19)$$

где $p^\pm = p_x \pm ip_y$,

$$(\hat{V}f)(\mathbf{p}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} V(|\mathbf{p} - \mathbf{k}|) f(\mathbf{k}). \quad (20)$$

Уравнение для функции $g(\mathbf{p})$ отделилось от системы (16)–(18), кроме того, в случае отличной от нуля энергии $E \neq 0$ функция $g(\mathbf{p})$ равна нулю, поэтому далее мы полагаем $g(\mathbf{p}) = 0$. Разложение системы уравнений (16)–(18) по малой константе связи аналогично нерелятивистскому разложению уравнения Дирака для электрона во внешнем поле [11].

Энергия связи $E - 2m$, характерное значение импульса и потенциал взаимодействия при малой константе связи удовлетворяют следующим условиям [11]:

$$|E - 2m| \ll m, \quad (21)$$

$$\frac{p^2}{m} \ll m, \quad (22)$$

$$\left| \frac{\int d\mathbf{k} f^+(\mathbf{k})(\hat{V}f)(\mathbf{k})}{\int d\mathbf{k} |f(\mathbf{k})|^2} \right| \ll m. \quad (23)$$

При разложении уравнений (16)–(18), как и в соотношении (23), предполагается, что основной вклад в интегралы по переменной \mathbf{k} дает область импульсов $k \ll m$. В случае кулоновского потенциала основной вклад в интегралы дает область $k \sim a_B^{-1}$, где a_B — боровский радиус. Таким образом мы предполагаем, что функции f , h и d убывают достаточно быстро при больших импульсах.

Для соединения WS_2 ширина запрещенной зоны и энергия связи равны $\Delta = 2.41$ эВ, $|E - 2m| = 0.32$ эВ; для WSe_2 — $\Delta = 2.02$ эВ, $|E - 2m| = 0.37$ эВ, см. [15]. Если сравнить энергию связи в этих соединениях с результатами работы [5], то получим, что величина эффективной константы связи порядка 0.5. При таких значениях константы связи точные результаты для энергий связи могут сильно отличаться от результата, полученного в главном приближении. Поэтому необходимо решить задачу точно, либо вычислить поправку к энергии связи. Точное численное решение УБС рассмотрено в разд. 4. В настоящем разделе мы найдем аналитически поправку к энергии связи.

Разложим уравнения (16)–(18) до второго порядка по потенциалу. Для этого подставим энергию E в виде

$$E = 2m + \varkappa \quad (24)$$

в (16)–(18), учитывая неравенства (21)–(23), раскладываем величину $\omega(\mathbf{p})$, считая что $p^2/m^2 \ll 1$, удерживаем слагаемые необходимого порядка и получаем

$$\begin{aligned} \varkappa f(\mathbf{p}) \approx & -\sqrt{2}p^- d(\mathbf{p}) - \left(1 - \frac{p^2}{2m^2}\right) (\hat{V}f)(\mathbf{p}) + \\ & + \frac{p^-}{\sqrt{2}m} (\hat{V}d)(\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (25)$$

$$h(\mathbf{p}) \approx \frac{p^+ d(\mathbf{p})}{2\sqrt{2}m}, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} d(\mathbf{p}) \approx & \frac{p^-}{\sqrt{2}m} h(\mathbf{p}) - \frac{p^+}{\sqrt{2}m} \left(1 - \frac{\varkappa}{2m}\right) f(\mathbf{p}) + \\ & + \frac{p^+}{2^{3/2}m^2} (\hat{V}f)(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (27)$$

Подстановка функции h в виде (26) в (27), а затем полученного результата для d в (25) приводит к следующему уравнению:

$$\begin{aligned} \varkappa f(\mathbf{p}) = & \frac{p^2}{m} f(\mathbf{p}) - (Vf)(\mathbf{p}) - \frac{p^4}{4m^3} f(\mathbf{p}) + \\ & + \frac{p^2}{2m^2} (Vf)(\mathbf{p}) - \frac{p^-(Vp+f)(\mathbf{p})}{2m^2}. \end{aligned} \quad (28)$$

В этом уравнении удержаны слагаемые, имеющие необходимый порядок точности. Видно, что оператор в правой части не является эрмитовым. Причина в том, что функция $f(\mathbf{p})$ не является волновой функцией уравнения Шредингера, поскольку условие её нормировки отличается от нормировки шредингеровской волновой функции, см. [11]. Для того чтобы получить гамильтониан, мы должны перейти к новой функции.

Волновая функция $\psi(E, \mathbf{p})$ нормирована условием (14), которое с необходимой точностью принимает следующий вид:

$$\rho \approx \int d\mathbf{p} \left(1 + \frac{p^2}{2m^2}\right) |f(\mathbf{p})|^2. \quad (29)$$

Поэтому, подставляя функцию f в виде

$$f(\mathbf{p}) = \left(1 - \frac{p^2}{4m^2}\right) \psi_{Sh}(\mathbf{p}), \quad (30)$$

в уравнение (29), получаем с необходимой точностью следующее выражение для плотности ρ :

$$\rho = \int d\mathbf{p} |\psi_{Sh}(\mathbf{p})|^2. \quad (31)$$

Видно, что сохраняющаяся плотность ρ (31) совпадает с плотностью для уравнения Шредингера. Подставляя функцию f в виде (30) в (28), затем выполняя преобразование Фурье, мы получаем уравнение Шредингера для функции ψ_{Sh} в координатном представлении:

$$\varkappa \psi_{Sh}(\mathbf{r}) = (\hat{H}_0 + \hat{H}_1) \psi_{Sh}(\mathbf{r}), \quad (32)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} - V(\mathbf{r}). \quad (33)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 = & -\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{4m^3 v_0^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2 v_0^2} (\nabla^2 V) + \\ & + \frac{i\hbar^2}{2m^2 v_0^2} [(\nabla V) \times \nabla]_z. \end{aligned} \quad (34)$$

Здесь $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y)$, $[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]$ — векторное произведение. В уравнении (32) мы восстановили размерность. Оператор \hat{H}_0 является гамильтонианом частицы с массой $m/2$, находящейся в потенциале $-V(\mathbf{r})$. Знак минус перед потенциалом связан с тем, что $V(\mathbf{r})$ — потенциал электрон-электронного взаимодействия. Гамильтониан \hat{H}_1 является эрмитовым оператором. Отметим, что уравнение (32) было получено ранее в работах [4, 9] при разложении

другого уравнения, а именно уравнения Шредингера для двух взаимодействующих дираковских частиц.

Рассмотрим решения уравнения (32) в случае кулоновского потенциала

$$V_C(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\epsilon r}, \quad (35)$$

где e — заряд электрона, ϵ — коэффициент диэлектрической проницаемости. Собственные функции и собственные значения гамильтониана $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$ можно найти с необходимой точностью, используя теорию возмущений. Представим \varkappa и $\psi_{Sh}(\mathbf{r})$ в виде

$$\varkappa = \varkappa^{(0)} + \delta\varkappa \quad \text{и} \quad \psi_{Sh}(\mathbf{r}) = \psi_{Sh}^{(0)}(\mathbf{r}) + \delta\psi_{Sh}(\mathbf{r}),$$

где индекс (0) обозначает лидирующий вклад, а $\delta\varkappa$ и $\delta\psi_{Sh}(\mathbf{r})$ — отвечают поправкам, связанным с гамильтонианом \hat{H}_1 . В лидирующем порядке теории возмущений имеем [6]

$$\varkappa_{n,l}^{(0)} = -\frac{m\alpha^2}{4(n+|l|+1/2)^2}, \quad (36)$$

$$\psi_{Sh}^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi a_B}} e^{-r/a_B}, \quad (37)$$

где n — радиальное квантовое число, l — азимутальное квантовое число, $\alpha = e^2/\epsilon$ — безразмерная константа связи, $a_B = 1/(m\alpha)$ — боровский радиус.

Поправка $\delta\varkappa_{0,0}$ к энергии основного состояния $\varkappa_{0,0}^{(0)}$ имеет вид

$$\delta\varkappa_{0,0} = \int d^2r \left(\psi_{Sh}^{(0)}(\mathbf{r}) \right)^\dagger \hat{H}_1 \psi_{Sh}^{(0)}(\mathbf{r}). \quad (38)$$

Поскольку $\psi_{Sh}^{(0)}(\mathbf{r})$ не равна нулю в точке $r = 0$, интеграл (38) в случае кулоновского потенциала расходится логарифмически на малых расстояниях:

$$\delta\varkappa_{0,0} \propto \int_0 \frac{dr}{r}, \quad (39)$$

см. [9]. В работе [9] для вычисления поправки $\delta\varkappa$, связанной с \hat{H}_1 , авторы ввели параметр регуляризации на малых расстояниях. Поэтому поправка зависит от этого параметра. Параметр невозможно найти в рамках описания взаимодействия электрона и дырки с помощью уравнения Шредингера для двух взаимодействующих дираковских частиц. Отметим, что гамильтониан, подобный \hat{H}_1 , возникает при разложении трехмерного уравнения Дирака для частицы в кулоновском поле. Однако никаких особенностей при вычислении поправок к энергиям в трехмерной задаче не возникает [11]. Сложности возникают из-за того, что электроны двигаются в двух

измерениях, а кулоновское поле распространяется в трех измерениях. Это приводит к тому, что потенциал на малых расстояниях ведет себя как $1/r$ вместо $\ln r$. Для потенциалов, сингулярность которых меньше чем $1/r$ при $r \rightarrow 0$, можно использовать разложение (32) и поправка $\delta\varkappa$ не будет содержать внешнего параметра регуляризации. Для кулоновского потенциала разложение УБС необходимо дополнить аккратнее.

Расходимость интеграла (38) на малых расстояниях для состояний $l = 0$ означает, что расстояния $r \ll a_B$ (большие импульсы $p \gg 1/a_B$) дают вклад в поправку. Как следствие, предположение, что основной вклад в интегралы в уравнениях (16)–(18) набирается в области малых импульсов, не является верным. Поэтому для вычисления поправки порядка α^4 к основному состоянию экситона необходимо учесть вклад области $k \lesssim m$ в интегралах, содержащихся в уравнениях (16)–(18).

3.1. Случай кулоновского потенциала

Для поиска поправок порядка α^4 к уровням, отвечающим $l = 0$, мы подставляем функции $f(\mathbf{p})$, $h(\mathbf{p})$ и $d(\mathbf{p})$ в виде

$$f(\mathbf{p}) = f(p), h(\mathbf{p}) = h(p)e^{2i\phi_p}, d(\mathbf{p}) = d(p)e^{i\phi_p} \quad (40)$$

в уравнения (16)–(18) и находим

$$E f(p) = 2m f(p) + \frac{p^2}{m} (f(p) + h(p)) - \frac{m}{\omega(\mathbf{p})} \times \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} V(P) \left(f(k) + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})}{2m^2} (f(k) + h(k)) \right), \quad (41)$$

$$E h(p) = -2m h(p) - \frac{p^2}{m} (f(p) + h(p)) + \frac{m}{\omega(\mathbf{p})} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} V(P) \left(h(k) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})^2 - [\mathbf{p} \times \mathbf{k}]^2}{p^2 k^2} + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})}{2m^2} (f(k) + h(k)) \right), \quad (42)$$

$$d(p) = -\frac{p}{\sqrt{2}m} (f(p) + h(p)), \quad (43)$$

где $P = |\mathbf{p} - \mathbf{k}|$, ϕ_p — угол вектора \mathbf{p} . При получении уравнений (41)–(43) мы преобразовали два последних слагаемых в правой части (18), используя уравнения (16) и (17), затем полученный результат для функции $d(p)$ подставили в (16) и (17). Видно, что уравнения (41) и (42) не содержат функции $d(p)$. Кроме того, функция $d(p)$ элементарно выражается через $f(p)$ и $h(p)$. Поэтому далее мы будем рассматривать только уравнения (41) и (42).

В правой части уравнений (41), (42) содержатся неэрмитовы операторы типа $(1/\omega(\mathbf{p})) \int d\mathbf{k} V(|\mathbf{p} - \mathbf{k}|)$. Подставляя функции f и h в виде

$$f(p) = \sqrt{\frac{m}{\omega(p)}} a(p), \quad h(p) = \sqrt{\frac{m}{\omega(p)}} b(p), \quad (44)$$

а энергию E в виде (24) в уравнения (41), (42), получаем

$$\begin{aligned} \varkappa a(p) &= \frac{p^2}{m}(a(p) + b(p)) - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) a(k) - \\ &- \frac{1}{2m^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) (\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})(a(k) + b(k)), \quad (45) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b(p) &= -\frac{\varkappa}{4m} b(p) - \frac{p^2}{4m^2}(a(p) + b(p)) + \\ &+ \frac{1}{4m} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})^2 - [\mathbf{p} \times \mathbf{k}]^2}{p^2 k^2} b(k) + \\ &+ \frac{1}{8m^3} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) (\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})(a(k) + b(k)), \quad (46) \end{aligned}$$

где введено обозначение

$$\tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) = \frac{m}{\sqrt{\omega(p)\omega(k)}} V(|\mathbf{p} - \mathbf{k}|). \quad (47)$$

Оператор $\tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k})$ удовлетворяет условию $\tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) = \tilde{V}(\mathbf{k}, \mathbf{p})$, поэтому операторы в правой части уравнений (45), (46) являются эрмитовыми. Видно, что функция \tilde{V} убывает быстрее, чем функция $V(\mathbf{p})$ при больших импульсах $p \gg m$. Это свойство и позволяет нам вычислить поправку порядка α^4 к энергиям $\varkappa_{n,0}^{(0)}$.

С необходимой точностью уравнение для функции $b(p)$ имеет вид

$$b(p) = -\frac{p^2}{4m^2} a(p).$$

Подставляя функцию $b(p)$ в уравнение (45) и удерживая слагаемые порядка p^4/m^2 , получаем уравнение для функции $a(p)$:

$$\begin{aligned} \varkappa a(p) &= \frac{p^2 a(p)}{m} - \frac{p^4 a(p)}{4m^3} - \\ &- \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \left(1 + \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})}{2m^2}\right) a(k). \quad (48) \end{aligned}$$

Мы решаем уравнение (48), используя теорию возмущений. Для этого подставляем величины \varkappa и a в виде

$$\varkappa = \tilde{\varkappa} + \delta\varkappa, \quad (49)$$

$$a(p) = \tilde{a}(p) + \delta a(p) \quad (50)$$

в (48) и получаем следующие уравнения для функции $\tilde{a}(p)$ и поправки $\delta\varkappa$:

$$\tilde{\varkappa} \tilde{a}(p) = \frac{p^2 \tilde{a}(p)}{m} - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \tilde{a}(k), \quad (51)$$

$$\begin{aligned} \delta\varkappa &= - \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{p^4 \tilde{a}^2(p)}{4m^3} - \\ &- \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}) \tilde{a}(p) \tilde{a}(k)}{2m^2}. \quad (52) \end{aligned}$$

Здесь предполагается, что функция $\tilde{a}(p)$ нормирована на единицу. Выполняя стандартные, но громоздкие вычисления, получаем следующий результат для $\tilde{\varkappa}$:

$$\tilde{\varkappa} = -m\alpha^2 + m\alpha^4 \left(-4 + \frac{\pi}{2} + 3 \ln 2 + 2 \ln \frac{1}{\alpha}\right). \quad (53)$$

Перейдем к вычислению поправки (52). Пользуясь уравнением (51), мы выражаем действие оператора p^2 на функцию $\tilde{a}(p)$ и получаем

$$\begin{aligned} - \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{p^4 \tilde{a}^2(p)}{4m^3} &= -\frac{1}{4m} \left(\tilde{\varkappa}^2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \tilde{a}^2(p) + \right. \\ &+ 2\tilde{\varkappa} \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \tilde{a}(p) \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \tilde{a}(k) + \\ &\left. + \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{k} d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \tilde{a}(k) \tilde{a}(q) \right). \quad (54) \end{aligned}$$

Первое слагаемое в скобках вычисляется тривиально в силу нормировки функции $\tilde{a}(p)$. Второе слагаемое уже содержит параметр $\tilde{\varkappa}$ перед интегралом, поэтому нам необходимо вычислить интеграл с точностью α^2 . Видно, что интегралы по переменным p и k сходятся на масштабах порядка $1/a_B$, поэтому с необходимой точностью мы заменяем $\tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k})$ на $V(|\mathbf{p} - \mathbf{k}|) = 2\pi\alpha/|\mathbf{p} - \mathbf{k}|$, а функцию $\tilde{a}(p)$ на

$$\tilde{a}_0(p) = \frac{2\sqrt{2\pi} a_B}{(1 + p^2 a_B^2)^{3/2}},$$

которая является фурье-образом функции (37) для основного состояния ($n = l = 0$), а также нулевым приближением для решения уравнения (51). После таких преобразований вычисление второго слагаемого становится тривиальным. Для вычисления третьего слагаемого преобразуем его к следующему виду:

$$\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{m}{\sqrt{p^2 + m^2}} \left[\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{2\pi\alpha\sqrt{m}\tilde{a}(k)}{|\mathbf{p} - \mathbf{k}|(k^2 + m^2)^{1/4}} \right]^2. \quad (55)$$

Сходимость интеграла по переменной k при больших k ($k \gg 1/a_B$) и произвольном импульсе p опре-

деляется только функцией $\tilde{a}(k)$. Поэтому в интеграле по k с необходимой точностью мы подставляем $\tilde{a}_0(k)$ вместо $\tilde{a}(k)$, пренебрегаем k по сравнению с m , вычисляем интеграл, затем переходим к переменной $\mathbf{p} = \mathbf{x}/a_B$, интегрируем по углу вектора \mathbf{x} и получаем

$$\frac{4m^2\alpha^3}{a_B} \int_0^\infty \frac{dx x}{(x^2 + 1)\sqrt{x^2 + \alpha^{-2}}}. \quad (56)$$

Здесь мы учли, что $a_B = 1/(m\alpha)$. Поскольку $\alpha \ll 1$, мы вычисляем интеграл (56) методом шивки и получаем следующий результат для третьего слагаемого:

$$4m^2\alpha^4(\ln 2 - \ln \alpha). \quad (57)$$

Складывая результаты для всех слагаемых, получаем, что с необходимой точностью

$$-\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{p^4 \tilde{a}^2(p)}{4m^3} = -m\alpha^4 \left(\ln 2 - \ln \alpha - \frac{3}{4} \right). \quad (58)$$

Для вычисления второго слагаемого в правой части выражения (52) найдем масштабы, которые дают основной вклад в интеграл. Поскольку интеграл содержит скалярное произведение в числителе, вклад областей, в которых один из импульсов по модулю много больше другого, подавляется при интегрировании по углам. Это означает, что основной вклад в интеграл дает область $p \sim k$. Если мы поставим \tilde{a}_0 вместо \tilde{a} и $V(|\mathbf{p} - \mathbf{k}|)$ вместо $\tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k})$, то интеграл при больших импульсах сходится, поскольку в числителе стоит шестая степень импульса, а в знаменателе седьмая. Поэтому большие импульсы вклада не дают и с необходимой точностью мы действительно можем сделать подобные замены. Интеграл набирается в области $p, k \sim 1/a_B$. Вычисляя интеграл с необходимой точностью, получаем

$$-\int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \tilde{V}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}) \tilde{a}(p) \tilde{a}(k)}{2m^2} = -m\alpha^4. \quad (59)$$

Отметим, что область $p, k \sim m$ приводит к поправкам порядка α^6 .

Складывая результаты (58) и (59) мы получаем

$$\delta\kappa = -m\alpha^4 \left(\ln \frac{1}{\alpha} + \ln 2 + \frac{1}{4} \right). \quad (60)$$

Таким образом, энергия основного состояния $E_{0,0}$ в лидирующем и следующим за лидирующем порядках по параметру α имеет вид

$$\begin{aligned} E_{0,0} &= 2m + \kappa = \\ &= 2m - m\alpha^2 \left(1 - \alpha^2 \left[\ln \frac{1}{\alpha} + \frac{\pi}{2} + \ln 4 - \frac{17}{4} \right] \right). \end{aligned} \quad (61)$$

Первое слагаемое в круглых скобках совпадает с результатом (36), второе слагаемое — поправка. Заметим, что выражение в квадратных скобках содержит логарифмический вклад $\ln \alpha$, который набирается в области интегрирования $a_B^{-1} \ll k \ll m$. Отметим, что логарифмический вклад $\alpha^4 \ln \alpha$ совпадает с результатом, полученным в [9].

Выполняя похожие вычисления, мы получаем следующее выражение для состояния, имеющего квантовые числа $n = 1, l = 0$:

$$\begin{aligned} E_{1,0} &= 2m + \kappa_{1,0} = \\ &= 2m - \frac{m\alpha^2}{9} \left(1 - \frac{\alpha^2}{3} \left[\ln \frac{12}{\alpha} + \frac{\pi}{2} - \frac{23}{4} \right] \right). \end{aligned} \quad (62)$$

Видно, что этот результат также содержит логарифмическое слагаемое $\ln \alpha$.

Отметим, что результаты (61) и (62) не содержат параметров регуляризации. Это связано с тем, что на расстояниях $r \sim 1/m$ эффективный потенциал взаимодействия отличается от кулоновского и является менее сингулярным.

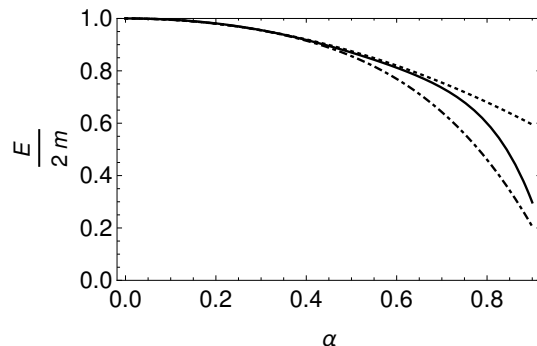


Рис. 1. Зависимость отношения $E/2m$ от параметра α для основного состояния. Сплошная, пунктирная и штрихпунктирная линии отвечают соответственно точному решению уравнения Бете–Солпитера, нулевому приближению (36) и результату (61)

Результаты (61) и (62) изображены на рис. 1 и 2 штрихпунктирной линией. Видно, что аналитические результаты хорошо согласуются с точными численными расчетами вплоть до $\alpha \lesssim 0.5$. Однако для параметров $\alpha > 0.5$ необходимо учитывать поправки более высоких порядков по параметру α .

4. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УБС ДЛЯ СЛУЧАЯ $l = 0$

Для численного решения УБС волновую функцию $\psi(\mathbf{p})$ удобно представить в следующем виде:

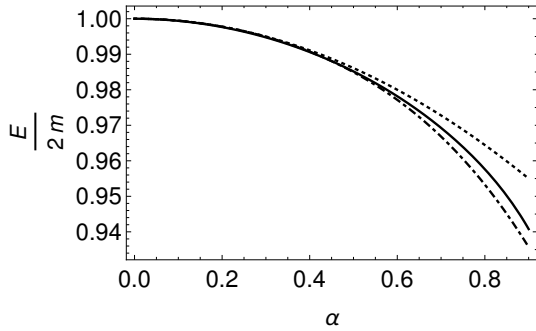


Рис. 2. Зависимость отношения $E/2m$ от параметра α для состояния с квантовыми числами $n = 1, l = 0$. Сплошная, пунктирная и штрихпунктирная линии отвечают соответственно точному решению уравнения Бете – Солпитера, нулевому приближению (36) и результату (62)

$$\psi(E, \mathbf{p}) = \frac{F(p) + H(p)}{\sqrt{2}} |1, 1\rangle + e^{i\phi_{\mathbf{p}}} d(p) |0, 0\rangle + e^{2i\phi_{\mathbf{p}}} \frac{F(p) - H(p)}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle, \quad (63)$$

где $\phi_{\mathbf{p}}$ – угол вектора \mathbf{p} . Подстановка этой функции в уравнение (8) приводит к следующей системе уравнений:

$$\frac{E}{2m} F(p) = H - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{V(P)}{2\omega(p)} [s^2 F(k) + c^2 H(k)], \quad (64)$$

$$\frac{E}{2m} H(p) = F + \frac{p^2}{m^2} F - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}) V(P)}{2m^2 \omega(p)} F(k) - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{V(P)}{2\omega(p)} [c^2 F(k) + s^2 H(k)], \quad (65)$$

$$d(p) = -\frac{p}{m} F(p). \quad (66)$$

Здесь для краткости введены следующие обозначения:

$$s^2 = \frac{pk - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})}{2pk},$$

$$c^2 = \frac{pk + (\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})}{2pk}.$$

Как и ранее, уравнение для функции $d(p)$ отделилось, поэтому далее мы рассматриваем только функции $F(p)$ и $H(p)$.

Мы решим уравнения (64) и (65) для кулоновского потенциала (35) и локализованного потенциала, не имеющего особенности в точке $r = 0$:

$$V(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}, \quad (67)$$

где U_0 и R – соответственно глубина и характерная ширина потенциала. В импульсном представлении этот потенциал имеет вид

$$V(\mathbf{p}) = \pi U_0 R^2 \exp\{-R^2 p^2/4\}. \quad (68)$$

4.1. Кулоновский потенциал

Для повышения точности численного решения интегральных уравнений мы выделяем асимптотическое поведение $F(p)$ и $H(p)$ при больших импульсах $p \gg m$. Для этого подставляем $F(p)$ и $H(p)$ в виде

$$F(p) = A_1/p^{2\beta}, \quad H(p) = A_2/p^{2\beta_1} \quad (69)$$

в уравнения (64), (65). Здесь A_1 и A_2 – некоторые константы. Удерживая лидирующие асимптотики, получаем уравнения для показателей β и β_1 :

$$\frac{\Gamma(\beta - 1/2)\Gamma(2 - \beta)}{\Gamma(\beta)\Gamma(5/2 - \beta)} = \frac{4}{\alpha}, \quad (70)$$

$$\frac{\Gamma(\beta_1 - 1/2)\Gamma(1 - \beta_1)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(3/2 - \beta_1)} = \frac{8}{\alpha}, \quad (71)$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция Эйлера. В лидирующем и следующем за лидирующем приближении по параметру α решения этих уравнений имеют вид

$$\beta \approx 2 - \frac{\alpha}{8}, \quad \beta_1 \approx 1 - \frac{\alpha}{8}. \quad (72)$$

Мы не будем описывать детали численного решения системы уравнений (64)–(66). Укажем лишь на то, что для численного решения удобно явно выделить асимптотическое поведение функций, переходя к новым функциям:

$$F(p) = \frac{\tilde{F}(p)}{(m^2 + p^2)^\beta}, \quad H(p) = \frac{\tilde{H}(p)}{(m^2 + p^2)^{\beta_1}}. \quad (73)$$

Функции $\tilde{F}(p)$ и $\tilde{H}(p)$ стремятся к некоторым константам при больших импульсах $p \gg m$. Далее мы приведем лишь полученные результаты для энергий связанных состояний частицы и дырки.

Найденная зависимость энергии основного состояния экситона при различных α представлена на рис. 1 и 3. Можно заметить, что точное решение для величины $E/2m$ существенно отличается от результата (36) при $\alpha > 0.7$. Мы обнаружили, что энергия основного состояния достигает валентной зоны ($E = -2m$) при $\alpha = 1 \pm 0.05$. Неопределенность связана с сильной зависимостью результата для уровня энергии от шага дискретизации при численном вычислении интегралов. С нашей точностью можно сказать, что критическое значение константы связи $\alpha_c = 1$. Вдали от критического значения константы связи результаты для энергии уровня слабо зависят от шага дискретизации. При $\alpha > \alpha_c$ энергетический уровень, отвечающий квантовым числам $n = l = 0$ исчезает из дискретного спектра,

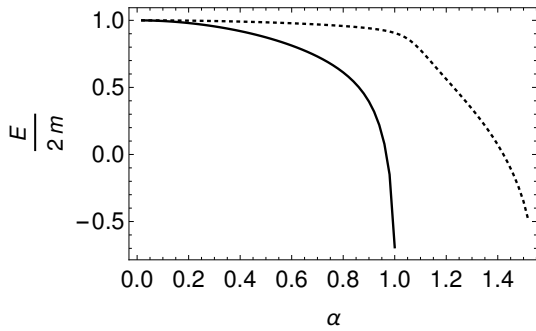


Рис. 3. Зависимость отношения $E/2m$ от параметра α . Сплошная линия соответствует состоянию с квантовыми числами $n = l = 0$. Пунктирная линия — $n = 1, l = 0$

см. рис. 3. Кроме того, на рис. 3 изображена зависимость $E(\alpha)$ для состояния с квантовыми числами $n = 1, l = 0$. Видно, что когда параметр α становится больше единицы, основным состоянием становится состояние с квантовыми числами $n = 1, l = 0$. Такое поведение аналогично поведению электрон-позитронной пары в квантовой электродинамике. Строго говоря, при достижении α критического значения вакуум становится нестабильным и начинают происходить процессы рождения пар частица-дырка, поэтому не имеет смысла рассматривать области $\alpha \geq \alpha_c$.

4.2. Локализованный потенциал

Для исследования поведения уровней энергии вблизи критического значения константы связи мы рассмотрели модельный локализованный потенциал (67). На рис. 4 изображена зависимость отно-

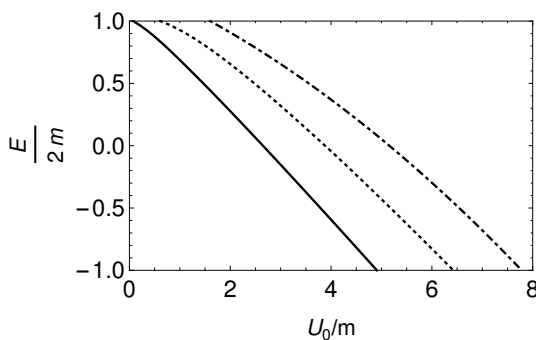


Рис. 4. Зависимость отношения $E/2m$ от параметра U_0 при $R = 5\hbar/m$. Сплошная линия отвечает состоянию с квантовыми числами $n = 0, l = 0$. Пунктирная — $n = 1, l = 0$. Штрихпунктирная — $n = 2, l = 0$

шения $E/2m$ от величины U_0/m для трех нижних уровней энергии при фиксированном радиусе $R = 5\hbar/m$. Видно, что при увеличении глубины потенциала положение уровней энергии плавно изменяется от $E = 2m$ до $E = -2m$. Нижний уровень

достигает $-2m$ при $\tilde{U} = \tilde{U}_c$. Видно, что для экспоненциального потенциала наклон функции $E(\tilde{U})$ остается конечным в отличие от поведения уровня в случае кулоновского потенциала. Такое поведение связано с тем, что локализованный потенциал регулярен при $r \rightarrow 0$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы исследовали взаимодействие электрона и дырки в двумерных дихалькогенидах переходных металлов. Для этого мы решили уравнение Бете–Солпитера, полученное в лидирующем приближении по потенциалу взаимодействия. Мы нашли зависимость нескольких нижних уровней энергии экситона от константы взаимодействия.

Как и авторы работ [4], мы показали, что в лидирующем приближении разложение уравнения Бете–Солпитера и разложение уравнения Шредингера для двух дираковских частиц совпадают. Мы обнаружили, что для потенциалов, сингулярность которых меньше чем $1/r$, разложения в следующем за лидирующим приближении также совпадают. Однако для кулоновского потенциала результаты существенно различаются. Так, в уравнении Шредингера возникают сингулярные операторы, тогда как УБС не содержит таковых. В случае кулоновского потенциала, используя разложение уравнения Бете–Солпитера (48) при малых константах связи, мы аналитически вычислили энергии основного и первого возбужденного состояний с точностью α^4 включительно. Было найдено, что в порядке α^4 результаты для энергий содержат слагаемые $\alpha^4 \ln \alpha$, которые набираются в области интегрирования по импульсам $a_B^{-1} \ll p \ll m$, этот результат совпал с результатами работы [9].

Мы численно исследовали поведение энергий связи электрона и дырки для кулоновского потенциала и локализованного потенциала. Получили, что для кулоновского потенциала критическое значение константы связи равно единице, $\alpha_c = 1$. Мы также показали, что в случае локализованного потенциала при увеличении глубины потенциала значения уровней энергии плавно изменяются от $2m$ до $-2m$. При достижении валентной зоны уровни исчезают из дискретного спектра. Такое поведение аналогично поведению уровней энергии электрона в потенциале, см., например, [17].

В заключение отметим, что найденные нами поправки к энергии экситона порядка α^4 не являются единственными. Существуют поправки такого же порядка, связанные с изменением потенциала на

малых расстояниях (потенциал Юлинга), а также с диаграммами типа «кросс-бокс». Подобные поправки не рассматривались в данной работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. K. S. Novoselov et al., *Science* **306**, 666 (2004).
2. Z. Y. Zhu, Y. C. Cheng, and U. Schwingenschlögl, *Phys. Rev. B* **84**, 153402 (2011).
3. A. S. Rodin and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **88**, 195437 (2013).
4. J. Zhou, W.-Y. Shan, W. Yao, and D. Xiao, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 166803 (2015).
5. M. Trushin, M. O. Goerbig, and W. Belzig, *Phys. Rev. B* **94**, 041301(R) (2016).
6. M. Trushin, M. O. Goerbig, and W. Belzig, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 187401 (2018).
7. M. Trushin, *Phys. Rev. B* **99**, 205307 (2019).
8. B. Scharf, D. V. Tuan, I. Zutic, and H. Dery, *J. Phys.: Condens. Matter* **31**, 203001 (2019).
9. N. V. Leppenen, L. E. Golub, and E. L. Ivchenko, *Phys. Rev. B* **102**, 155305 (2020).
10. M. F. C. Martins Quintela, J. C. G. Henriques, N. M. R. Peres, *Phys. Stat. Sol. B*, 2200097 (2022).
11. В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984).
12. C. Itzykson, and J.-B. Zuber, *Quantum field theory*, McGraw-Hill (1980).
13. G. F. Glinskii and Zl. Koinov, *Theor. Math. Phys.* **70**, 252 (1987).
14. D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng, X. Xu, and W. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 196802 (2012).
15. A. Chernikov, T. C. Berkelbach, H. M. Hill et al., *Phys. Rev. Lett.* **113**, 076802 (2014).
16. K. He, N. Kumar, L. Zhao, Z. Wang, K. F. Mak, H. Zhao, and J. Shan, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 026803 (2014).
17. А.И. Ахиейзер, В.Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1981).