

Ảnh hưởng của phonon lên trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình hai dải năng lượng có tương tác điện tử - phonon

Đỗ Thị Hồng Hải^{1,*}, Hồ Quỳnh Anh¹
¹ Trường Đại học Mở - Địa chất

TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của phonon lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình hai chiều hai dải năng lượng có tương tác điện tử - phonon. Bằng áp dụng lý thuyết trường trung bình, chúng tôi rút ra hệ phương trình tự hợp cho phép xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton. Giải hệ phương trình tự hợp bằng phương pháp tính số, chúng tôi thu được sự phụ thuộc của tham số trật tự vào các thông số của mô hình. Trên cơ sở kết quả tính số, chúng tôi thiết lập các giản đồ pha mô tả trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ. Kết quả khẳng định mối liên hệ mật thiết của tần số phonon và hằng số tương tác điện tử - phonon trong việc thiết lập trạng thái ngưng tụ exciton ở nhiệt độ thấp.

Từ khóa: ngưng tụ exciton; lý thuyết trường trung bình; mô hình hai dải năng lượng; tần số phonon; tương tác điện tử - phonon.

1. Đặt vấn đề

Exciton là giả hạt boson được tạo bởi lực hút tĩnh điện giữa điện tử và lỗ trống. Trạng thái ngưng tụ của exciton trong vật liệu bán kim loại, bán dẫn đã được tiên đoán về mặt lý thuyết từ những năm 60 của thế kỷ trước (Mott, 1961). Tuy nhiên cho đến nay, trạng thái này vẫn thu hút sự tập trung nghiên cứu không chỉ của các nhà vật lý mà của cả những nhà nghiên cứu công nghệ (Apinyan và Kopeć, 2019; Cam, 2019; Efimkin và nnk, 2020; Hamada và nnk, 2017; Lee và nnk, 2019). Với khối lượng hiệu dụng rất nhỏ (cỡ 1/10 khối lượng của điện tử tự do) nên exciton có thể ngưng tụ ở nhiệt độ cao hơn rất nhiều so với nhiệt độ tới hạn trạng thái ngưng tụ Bose-Einstein của các nguyên tử (Moskalenko và Snoko, 2000). Vì vậy, những hệ với trạng thái ngưng tụ exciton có khả năng mở ra tiềm năng ứng dụng rất lớn trong công nghệ hiện đại như công nghệ laser, công nghệ bán dẫn,... (Littlewood và nnk, 2004).

Về mặt lý thuyết, trạng thái ngưng tụ của exciton đã được nghiên cứu một cách kỹ lưỡng nhưng chủ yếu dựa trên những đặc tính hoàn toàn điện tử như dựa trên mô hình Falicov-Kimball mở rộng (EFKM), là mô hình Falicov – Kimball có tính tới nhảy nút của các điện tử trên mức f . Tuy nhiên, chỉ với mô hình EFKM, người ta đã không tính tới những ảnh hưởng của phonon lên trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ. Trong khi đó, một số thí nghiệm gần đây trên vật liệu kim loại chuyển tiếp 1T-TiSe₂, đã cho thấy sự biến dạng mạng tinh thể là đáng kể và là cơ sở để hình thành trạng thái ngưng tụ của exciton (Di Salvo và nnk, 1976; Monney và nnk, 2010). Bên cạnh đó, trong vật liệu TmSe_{0,45}Te_{0,55}, tại áp suất thích hợp, một trạng thái liên kết của lỗ trống $4f$ ở điểm Γ và điện tử $5d$ tại điểm X có thể được tạo thành nhờ hỗ trợ của phonon dạng $\Gamma-X$ (Wachter và nnk, 2004; Wachter, 2018). Hơn nữa, khi nghiên cứu trạng thái ngưng tụ của exciton trong kim loại chuyển tiếp Ta₂NiSe₅ bằng tính toán cấu trúc vùng và phân tích trường trung bình cho mô hình Hubbard ba dải với bậc tự do phonon, Kaneko và cộng sự đã khẳng định cấu trúc mạng tinh thể thay đổi từ dạng thoi sang dạng đơn tà (Kaneko và nnk, 2013). Rõ ràng, sự lệch mạng hay ảnh hưởng của phonon là rất quan trọng trong các loại vật liệu này, đặc biệt là trong việc hình thành trạng thái ngưng tụ exciton.

Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu lý thuyết về sự hình thành trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình hai chiều hai dải năng lượng có tương tác điện tử - phonon bằng lý thuyết trường trung bình. Trong đó, chúng tôi tập trung khảo sát ảnh hưởng của tần số phonon và hằng số tương tác điện tử - phonon trong việc thiết lập trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình ở trạng thái cơ bản, tức ở nhiệt độ không.

Bài báo được chia thành 4 phần. Trong đó, phần 2 chúng tôi giới thiệu mô hình hai chiều hai dải năng lượng có tương tác điện tử - phonon. Trong phần này, chúng tôi áp dụng lý thuyết trường trung bình cho mô hình để rút ra hệ phương trình tự hợp cho phép xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton. Kết quả tính số và thảo luận được thể hiện ở phần 3. Cuối cùng, phần 4 trình bày kết luận của bài báo.

* Tác giả liên hệ

Email: dothihonghai@hmg.edu.vn

2. Mô hình và phương pháp tính

Trong biểu diễn xung lượng, mô hình hai dải năng lượng có tương tác điện tử - phonon được mô tả bởi Hamiltonian sau:

$$H = H_0 + H_{int} \quad (1)$$

trong đó: H_0 mô tả phần năng lượng không tương tác của hệ điện tử trên dải dẫn, dải hóa trị và hệ phonon có dạng:

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} + \omega_0 \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \quad (2)$$

với: $c_{\mathbf{k}}^\dagger (c_{\mathbf{k}})$, $f_{\mathbf{k}}^\dagger (f_{\mathbf{k}})$ lần lượt là các toán tử sinh (hủy) của các điện tử c trên dải dẫn, điện tử f trên dải hóa trị và $b_{\mathbf{k}}^\dagger (b_{\mathbf{k}})$ là toán tử sinh (hủy) phonon mang xung lượng \mathbf{k} . Ở đây, chúng tôi chỉ xét các phonon quang mô tả bởi mô hình Einstein với ω_0 là hằng số. Điều này hoàn toàn phù hợp với việc mô tả hệ phonon trong các hợp chất dichalcogenide kim loại chuyển tiếp ở vùng nhiệt độ thấp (Wachter và Bucher, 2013; Wachter, 2018; Weber và nnk, 2011). Trong gần đúng liên kết chặt, các hệ thức tán sắc cho điện tử c và điện tử f được cho bởi:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{c,f} = \varepsilon^{c,f} - t^{c,f} \gamma_{\mathbf{k}} - \mu \quad (3)$$

với: $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{c,f}$ là năng lượng tại nút của điện tử c và điện tử f . Sự khác nhau của hai giá trị năng lượng này cho mức độ xen phủ của hai dải năng lượng. $t^{c,f}$ là tích phân nhảy nút tương ứng của điện tử c và điện tử f . Thông thường t^f được chọn nhỏ hơn t^c thể hiện điện tử trên dải hóa trị kém linh động hơn điện tử trên dải dẫn. Trong mạng hai chiều hình vuông với hằng số mạng $a = 1$, ta có $\gamma_{\mathbf{k}} = 2(\cos k_x + \cos k_y)$ chỉ bước nhảy trong mạng tinh thể và μ là thế hóa học.

H_{int} mô tả phần năng lượng tương tác của hệ điện tử với phonon với hằng số tương tác g :

$$H_{int} = \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} [c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} (b_{-\mathbf{q}}^\dagger + b_{\mathbf{q}}) + f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (b_{-\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^\dagger)] \quad (4)$$

trong đó: N là số nút mạng tinh thể. Ghép cặp điện tử $c-f$ tương đương với một trạng thái exciton. Tại nhiệt độ đủ thấp, trong hệ hai chiều, các exciton với xung lượng hữu hạn $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ có thể ngưng tụ, được thể hiện bởi giá trị trung bình $d_{\mathbf{k}} = \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle$ tại xung lượng \mathbf{k} khác không. Đại lượng này biểu thị sự lai hóa giữa các điện tử c và điện tử f nên được gọi là tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton. Trong bài toán này, để khảo sát sự tồn tại của trạng thái ngưng tụ exciton, chúng tôi cũng xem đại lượng:

$$d = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle + \langle f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \rangle) \quad (5)$$

như tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton. Tham số trật tự khác không thể hiện hệ tồn tại trong trạng thái ngưng tụ.

Trong gần đúng trường trung bình, Hamiltonian trong phương trình (1) được tách thành hai phần, phần điện tử và phần phonon. Trong đó, thành phần phonon được chéo hóa bằng việc định nghĩa toán tử phonon mới $B_{\mathbf{k}}$ còn phần điện tử có thể chéo hóa bằng cách sử dụng phép biến đổi Bogoliubov (Bogoliubov và nnk, 1959) với các toán tử giả hạt fermion $C_{1\mathbf{k}}$ và $C_{2\mathbf{k}}$. Kết quả ta thu được Hamiltonian trong gần đúng trường trung bình chéo hóa hoàn toàn, được viết dưới dạng toàn phương của các toán tử sinh và hủy:

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^1 C_{1\mathbf{k}}^\dagger C_{1\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^2 C_{2\mathbf{k}}^\dagger C_{2\mathbf{k}} + \omega_0 \sum_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^\dagger B_{\mathbf{k}} \quad (6)$$

trong đó: các năng lượng giả hạt điện tử được cho bởi

$$E_{\mathbf{k}}^{1,2} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^f + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^c}{2} \mp \frac{\text{sgn}(\varepsilon_{\mathbf{k}}^f - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^c)}{2} \Gamma_{\mathbf{k}} \quad (7)$$

với:

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = \left[(\varepsilon_{\mathbf{k}}^f - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^c)^2 + 4|\Delta|^2 \right]^{1/2} \quad (8)$$

$$\Delta = \frac{g}{\sqrt{N}} (b_{-\mathbf{Q}}^\dagger + b_{-\mathbf{Q}}) \quad (9)$$

Sử dụng Hamiltonian này, chúng ta thu được giá trị kỳ vọng:

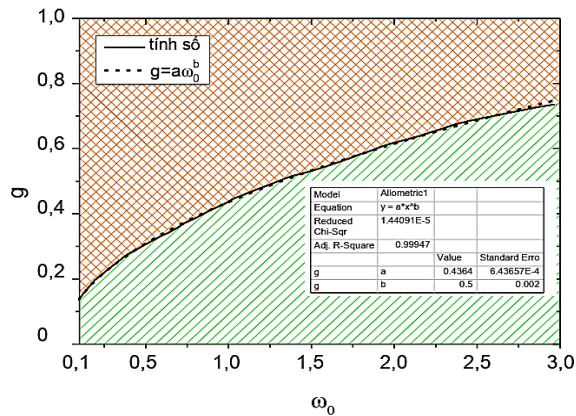
$$d_{\mathbf{k}} = \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle = -[n_F(E_{\mathbf{k}}^1) - n_F(E_{\mathbf{k}}^2)] \text{sgn}(\varepsilon_{\mathbf{k}}^f - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^c) \frac{\Delta}{\Gamma_{\mathbf{k}}} \quad (10)$$

trong đó: $n_F(E_{\mathbf{k}}^{1,2})$ là hàm phân bố Fermi-Dirac.

3. Kết quả và thảo luận

Trong phần này, chúng tôi trình bày kết quả tính số để thảo luận ảnh hưởng của tần số phonon và hằng số tương tác điện tử - phonon lên sự ngưng tụ của exciton trong mô hình được mô tả ở phần trước. Kết quả được tìm ra từ việc giải số các phương trình tự hợp (7) – (10) với sai số tương đối là 10^{-6} . Hệ ở trạng thái ngưng tụ exciton khi tham số trật tự khác không. Trong bài toán này, chúng tôi chọn hệ hai chiều với $N = 150 \times 150$ nút mạng. Để thuận tiện, chúng tôi chọn $|t^c| = 1$ coi là đơn vị của năng lượng và tính toán với

các giá trị cố định: $t^f = 0,3$, $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 1$ trong vùng lấp đầy một nửa với tổng mật độ hạt điện tử: $n^c + n^f = 1$. Khi đó, thế hóa μ được thay đổi để thỏa mãn điều kiện này. Ở đây, chúng tôi sử dụng hệ đơn vị năng lượng tổng quát với $\hbar = c = k_B = 1$.

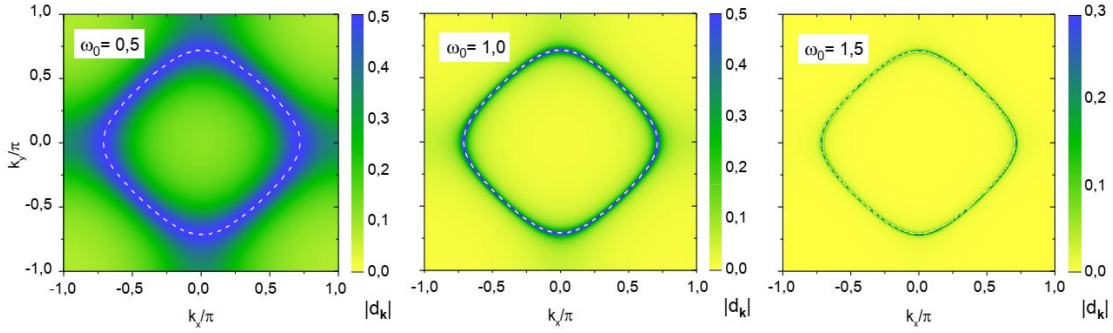


Hình 1. Giản đồ pha trạng thái cơ bản của mô hình trong mặt phẳng (ω_0, g)
Pha ngưng tụ exciton được biểu thị bởi vùng kẻ ca-rô

Trước tiên, chúng tôi biểu thị trên Hình 1 giản đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton của mô hình trong mặt phẳng (ω_0, g) tại nhiệt độ không. Giá trị nhiệt độ không ở đây được chúng tôi lấy trong tính toán số là $T = 10^{-3}$. Giản đồ pha được xây dựng nhờ khảo sát sự phụ thuộc của tham số trật tự d xác định bởi công thức (5) vào hằng số tương tác điện tử - phonon g ứng với mỗi giá trị xác định của tần số phonon ω_0 . Trên cơ sở dữ liệu tính số, chúng tôi xác định giá trị tương ứng của g với mỗi ω_0 khi giá trị của tham số trật tự $d \approx 10^{-3}$. Hình 1 cho thấy, ứng với mỗi giá trị xác định của tần số phonon, ta luôn tìm thấy vùng ngưng tụ exciton (vùng kẻ ca-rô) khi hằng số tương tác điện tử - phonon lớn hơn một giá trị tới hạn g_c . Tần số phonon càng lớn thì giá trị tới hạn g_c càng lớn. Đặc tính này đã được đề cập trong trường hợp một chiều, trong đó mối quan hệ tuyến tính giữa bình phương hằng số tương tác tới hạn g_c và tần số phonon đã được xác nhận cả trong tính toán số và giải tích (Phan và nnk, 2013). Trong tính toán của chúng tôi, mối liên hệ có dạng hàm bậc hai của hằng số tương tác điện tử - phonon và tần số phonon cũng đã được xác nhận bằng việc khớp hàm số trên phần mềm Origin (đường đứt nét). Kết quả tính toán cho hệ hai chiều của chúng tôi về mối liên hệ của hằng số tương tác điện tử - phonon và tần số phonon hoàn toàn phù hợp với trường hợp một chiều. Đó là do tính toán của chúng tôi và tính toán trong tài liệu (Phan và nnk, 2013) đều dựa trên cơ sở của lý thuyết trường trung bình. Kết quả vì vậy không phụ thuộc đáng kể vào số chiều của hệ, ngoại trừ trường hợp mật Fermi ở trạng thái kết tở hoàn hảo, khi đó với hệ hai chiều, mật độ trạng thái của hệ điện tử không tương tác phân kỳ tại mức Fermi. Với $g < g_c$, tương tác điện tử - phonon chưa đủ lớn để thiết lập trạng thái liên kết điện tử $c-f$ hình thành exciton nên không thể hình thành trạng thái ngưng tụ. Khe năng lượng không tồn tại và hệ ở trong trạng thái bán kim loại (vùng gạch chéo). Kết quả cũng cho thấy vùng ngưng tụ exciton bị thu hẹp lại nếu tần số phonon càng lớn. Khi tần số phonon càng lớn, tương tác điện tử - phonon phải đủ lớn mới có thể thiết lập được trạng thái liên kết điện tử $c-f$ hình thành exciton và trạng thái ngưng tụ.

Giản đồ pha ở Hình 1 cũng thể hiện, ứng với mỗi giá trị xác định của hằng số tương tác điện tử - phonon, trạng thái ngưng tụ exciton chỉ được thiết lập nếu tần số phonon nhỏ hơn một giá trị tới hạn. Để thấy rõ hơn vai trò của tần số phonon trong việc hình thành trạng thái ngưng tụ exciton, chúng tôi biểu thị dưới đây sự phụ thuộc vào xung lượng của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton d_k ở trạng thái cơ bản khi thay đổi tần số phonon. Đại lượng này biểu thị vùng không gian xung lượng trong đó các điện tử c và điện tử f có liên quan đến sự hình thành và ngưng tụ của exciton. Hình 2 cho ta bức tranh của $|d_k|$ khi cố định hằng số tương tác điện tử - phonon $g = 0,5$ tại nhiệt độ không, ứng với một vài giá trị của ω_0 . Trong nghiên cứu này, chúng tôi chọn $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 1$ tức là các dải năng lượng của điện tử c và điện tử f xen phủ mạnh và cả hai loại điện tử đều tham gia hình thành bề mặt Fermi. Hình 2 cho thấy, với hằng số tương tác điện tử - phonon $g = 0,5$, tham số trật tự $|d_k|$ luôn có giá trị cực đại tại các xung lượng gần xung lượng Fermi (được biểu thị bằng đường đứt nét màu trắng). Điều này khẳng định chỉ những điện tử nằm xung quanh mức Fermi mới tham gia vào quá trình ghép cặp hình thành exciton, mức Fermi đóng vai trò quan trọng quyết định trạng thái ngưng tụ của exciton. Kịch bản này hoàn toàn tương tự với sự ngưng tụ của các cặp Cooper trong lý thuyết BCS của siêu dẫn (Bardeen và nnk, 1957). Theo lý thuyết BCS, do sự ghép cặp của cặp điện tử - điện tử với spin trái chiều mà khe năng lượng hình thành xung quanh mức Fermi với bề rộng khe tỉ lệ với tần số Debye. Ở nhiệt độ thấp, các cặp Cooper này sẽ ngưng tụ và hình thành trạng thái siêu dẫn. Trạng thái

ngưng tụ này sẽ bị phá vỡ nếu có năng lượng đủ lớn phá hủy trạng thái kết cặp, khi đó khe năng lượng cũng không còn và hệ chuyển sang trạng thái kim loại hay chất lỏng Fermi thông thường. Trong bài toán của chúng tôi, trạng thái ngưng tụ exciton cũng không còn nếu trạng thái liên kết cặp điện tử $c-f$ bị phá vỡ khi năng lượng đủ lớn. Khi đó, hệ chuyển sang trạng thái bán kim loại hay trạng thái plasma của điện tử. Kết quả này góp phần làm sáng tỏ những quan sát thực nghiệm trong vật liệu $\text{TmSe}_{0,45}\text{Te}_{0,55}$ ở áp suất lớn. Trong trường hợp này, hai dải $4f$ và $5d$ xen phủ nhau, do sự tán xạ phonon mà điện tử $4f$ kết cặp với điện tử $5d$ để tạo thành exciton. Các exciton này ngưng tụ khi nhiệt độ đủ thấp (Wachter, 2001; Wachter, 2018). Khi tăng ω_0 , giá trị của tham số trật tự giảm và khi $\omega_0 = 1,5$, do hằng số tương tác điện tử - phonon chưa đủ lớn nên $|d_{\mathbf{k}}|$ trở nên rất nhỏ, trạng thái ngưng tụ bị phá vỡ và hệ xem như đồng nhất. Kết quả này cũng hoàn toàn phù hợp với giản đồ pha được biểu thị trên Hình 1.



Hình 2: Giá trị của tham số trật tự $d_{\mathbf{k}}$ phụ thuộc xung lượng \mathbf{k} trong vùng Brillouin thứ nhất với một vài giá trị khác nhau của ω_0 khi $g = 0,5$ tại $T = 0$. Xung lượng Fermi được xác định bởi đường đứt nét màu trắng

4. Kết luận

Như vậy, trong bài báo này, chúng tôi đã áp dụng thành công lý thuyết trường trung bình cho mô hình hai dải năng lượng có tương tác điện tử – phonon để đề cập đến ảnh hưởng của phonon lên trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ bán kim loại hai chiều. Kết quả tính toán giải tích được thể hiện qua hệ phương trình tự hợp cho phép xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton. Giải hệ phương trình tự hợp bằng phương pháp tính số, kết quả tính số cho thấy, với tần số phonon xác định, hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ exciton nếu cường độ tương tác điện tử – phonon lớn hơn một giá trị tới hạn. Giản đồ pha trạng thái cơ bản của chúng tôi cũng cho thấy mối quan hệ có dạng hàm bậc hai của hằng số tương tác điện tử – phonon và tần số phonon. Tần số phonon càng lớn thì giá trị tới hạn của hằng số tương tác điện tử – phonon cho chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton càng lớn. Mặc dù tính toán cho hệ hai chiều, nhưng kết quả nhận được của chúng tôi về mối liên hệ của hằng số tương tác điện tử – phonon và tần số phonon hoàn toàn phù hợp với trường hợp một chiều. Bằng cách khảo sát chi tiết hơn sự phụ thuộc xung lượng của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton, chúng tôi khẳng định trạng thái ngưng tụ dạng BCS của các exciton trong hệ tương tự với trạng thái siêu dẫn hình thành từ các cặp Cooper trong lý thuyết BCS ở nhiệt độ thấp. Những nghiên cứu kỹ lưỡng hơn về ảnh hưởng của phonon âm lên trạng thái này sẽ được chúng tôi thực hiện trong tương lai.

Tài liệu tham khảo

- Apinyan, V., Kopeć, T.K. 2019. Excitonic Tunneling in the AB-bilayer Graphene Josephson Junctions. *Journal of Low Temperature Physics*, 194: 325–359.
- Bardeen, J., Cooper, L.N., Schrieffer, J.R. 1957. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 108:1175;
- Bardeen, J., Cooper, L.N., Schrieffer, J.R. 1957. Microscopic theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 106:162.
- Bogoliubov, N.N., Tolmachev, V.V., Shirkov, D.V. 1959. *New Method in the Theory of Superconductivity*. Consultants Bureau, New York.
- Hoang Ngọc Cam, 2019. Biexciton as a Feshbach resonance and Bose–Einstein condensation of paraexcitons in Cu_2O . *New J. Phys.* 21: 013035.
- Di Salvo, F.J., Moncton, D.E., Waszczak, J.V. 1976. Electronic properties and superlattice formation in the semimetal TiSe_2 . *Phys. Rev. B*, 14:4321.
- Efimkin, D.K., Burg, G.W., Tutuc, E., MacDonald, A.H. 2020. Tunneling and fluctuating electron-hole Cooper pairs in double bilayer graphene. *Physical Review B*, 101: 035413.

- Hamada, K., Kaneko, T., Miyakoshi, S., Ohta, Y. 2017. *Excitonic insulator state of the extended Falicov–Kimball model in the cluster dynamical impurity approximation*. Journal of the Physical Society of Japan, 86: 074709.
- Kaneko, T., Toriyama, T., Konishi, T., Ohta, Y. 2013. Orthorhombic-to-monoclinic phase transition of Ta₂NiSe₅ induced by the Bose-Einstein condensation of excitons. *Phys. Rev. B*, 87:035121.
- Lee, J., Kang, C.J., Eom, M.J., Kim, J.S., Min, B.I., Yeom, H.W. 2019. Strong interband interaction in the excitonic insulator phase of Ta₂NiSe₅, *Physical Review B*. 99: 075408.
- Littlewood, P.B., Eastham, P.R., Keeling, J.M.J., Marchetti, F.M., Simons, B.D., Szymanska, M.H. 2004. Models of coherent exciton condensation. *J. Phys. Condens. Matter*, 16: S3597.
- Monney, C., Schwier, E. F., Garnier, M. G., Mariotti, N., Didiot, C., Beck, H., Aebi, P., Cercellier, C., Marcus, J., Battaglia, C., Berger, H., Titov, A.N. 2010. Temperature-dependent photoemission on 1T-TiSe₂: Interpretation within the exciton condensate phase model. *Phys. Rev. B*, 81:155104.
- Moskalenko, S.A., Snoke, D.W. 2013. *Bose-Einstein Condensation of Excitons and Biexcitons*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000.
- Mott, N.F. 1961. The transition to the metallic state. *Philos. Mag.*, 6:287.
- Phan, V.N., Becker, K.W., Fehske, H. Exciton condensation due to electron-phonon interaction. *Phys. Rev. B*, 88:205123.
- Wachter, P. 2001. Exciton condensation in an intermediate valence compound: TmSe_{0.45}Te_{0.55}. *Solid State Commun.*, 118:645.
- Wachter, P., Bucher, B., Malar, J. 2004. Possibility of a superfluid phase in a Bose condensed excitonic state. *Phys. Rev. B*, 69: 094502.
- Wachter, P., Bucher, B. 2013. Exciton condensation and its influence on the specific heat. *Physica B*, 408:51.
- Wachter, P. Edited by Pyshkin, S.L. 2018, Exciton Condensation and Superfluidity in TmSe_{0.45}Te_{0.55}, Chaper 2, In book: *Excitons*, IntechOpen, London, UK.
- Weber, F., Rosenkranz, S., Castellán, J.P., Osborn, R., Karapetrov, G., Hott, R., Heid, R., Bohnen, K.P., Alatas, A. 2011. Electron-phonon coupling and the soft phonon mode in TiSe₂. *Phys. Rev. Lett.*, 107:266401.

ABSTRACT

Effects of phonon on the excitonic condensation state in the two-band model involving electron – phonon interaction

Do Thi Hong Hai^{1,*}, Ho Quynh Anh¹
¹ Hanoi University of Mining and Geology

In this paper, influence of phonons on the excitonic condensation state in the two-band model involving electron – phonon interaction is investigated. Applying mean-field theory, we have derived a set of self-consistent equations determining the excitonic condensation order parameters which depend on the parameters of the model. Phase diagrams of the excitonic condensation state in the system is then established. Our results affirm the close relationship of the phonon frequency and the electron-phonon interaction constant in the formation of the excitonic condensation state at low temperature.

Keywords: excitonic condensation; mean-field theory; the two-band model; phonon frequency; electron-phonon interaction.