

Ảnh hưởng của độ linh động của điện tử lên trạng thái điện môi exciton trong vật liệu bán kim loại

Đỗ Thị Hồng Hải¹, Nguyễn Thị Hậu^{1,*}
¹ Trường Đại học Mở - Địa chất

TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của độ linh động điện tử lên trạng thái điện môi exciton trong vật liệu bán kim loại thông qua mô hình hai dải năng lượng có xét đến tương tác điện tử - phonon. Áp dụng gần đúng Hartree-Fock để tính toán giải tích, chúng tôi thu được các phương trình tự hợp cho tham số trật tự đặc trưng cho trạng thái điện môi exciton. Giải hệ phương trình tự hợp bằng phương pháp tính số, kết quả khẳng định vai trò của mức độ linh động của điện tử f trong việc hình thành trạng thái điện môi exciton trong hệ ở nhiệt độ đủ thấp khi hằng số tương tác điện tử - phonon đủ lớn.

Từ khóa: Gần đúng Hartree-Fock; vật liệu bán kim loại; mô hình hai dải năng lượng có tương tác điện tử - phonon; điện môi exciton.

1. Đặt vấn đề

Exciton là trạng thái kết cặp của điện tử - lỗ trống, vì vậy có spin nguyên và khối lượng hiệu dụng rất nhỏ cỡ $1/10$ khối lượng của điện tử tự do. Ở nhiệt độ đủ thấp, các giả hạt boson này sẽ ngưng tụ trong một trạng thái lượng tử, và cấu hình của bán kim loại hoặc bán dẫn được chuyển sang trạng thái điện môi tương ứng. Trạng thái này được gọi là trạng thái điện môi exciton (Excitonic Insulator – EI), được đề xuất về mặt lý thuyết từ 60 năm trước (Mott, 1961). Các dữ liệu thực nghiệm gần đây thu được trên một số vật liệu đã khẳng định các dự đoán lý thuyết về trạng thái EI. Chẳng hạn như, từ kết quả quan sát sự phụ thuộc nhiệt độ của quang phổ điện tử (ARPES) trên hợp chất kim loại chuyển tiếp $1T\text{-TiSe}_2$ người ta đã khẳng định sự tồn tại của trạng thái EI (Cercellier và nkk, 2007; Monney và nkk, 2010). Hay dấu hiệu quang phổ phát xạ tia X và ARPES trên vật liệu giả một chiều Ta_2NiSe_5 cho thấy trạng thái cơ bản của hệ có thể được xem như là trạng thái EI giữa lỗ trống Ni $3d$ - Se $4p$ và điện tử Ta $5d$ (Wakisaka và nkk, 2009). Cũng với vật liệu này, kết quả nghiên cứu thực nghiệm độ dẫn quang đã khẳng định sự tồn tại của trạng thái EI (Lu và nkk, 2017). Chính vì vậy, việc khảo sát bản chất trạng thái EI đang được quan tâm nghiên cứu trên cả lĩnh vực lý thuyết (Debnath và nkk, 2017; Domon và nkk, 2018; Hamada và nkk, 2017; Katsch và nkk, 2020; Wang và nkk, 2018) và thực nghiệm (Förg và nkk, 2019; Kogar và nkk, 2017; Seki và nkk, 2014).

Các mô hình lý thuyết thường được sử dụng để khảo sát trạng thái EI có thể kể đến như mô hình khối lượng hiệu dụng Mott-Wannier (Bronold và Fehske, 2006; Monney và nkk, 2010) hay mô hình Falicov-Kimball mở rộng (Ihle và nkk, 2008; Phan và nkk, 2011; Zenker và nkk, 2010). Trong các mô hình này, việc khảo sát trạng thái EI hoàn toàn theo cơ chế điện tử, tức là chỉ quan tâm đến tương tác Coulomb giữa điện tử với lỗ trống và đã bỏ qua tương tác điện tử với phonon. Trong khi đó, các hệ điện tử thấp chiều lại dễ bị biến dạng cấu trúc do tương tác điện tử với phonon. Điều đó được thể hiện rõ trong các kết quả nghiên cứu gần đây về trạng thái EI trên một số vật liệu bán kim loại, như Ta_2NiSe_5 , $1T\text{-TiSe}_2$, ... (Di Salvo và nkk, 1976; Kaneko và nkk, 2013; Monney và nkk, 2010; Nakano và nkk, 2018). Như vậy, ảnh hưởng của của phonon trong việc hình thành trạng thái EI trong các vật liệu trên là rất quan trọng. Do đó, để khảo sát trạng thái EI trong vật liệu bán kim loại, chúng tôi quan tâm tới mô hình điện tử hai chiều hai dải năng lượng có xét đến tương tác điện tử - phonon.

Trong bài báo này, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của mức độ linh động của điện tử lên sự hình thành trạng thái EI trong mô hình hai chiều hai dải năng lượng có xét đến tương tác điện tử - phonon. Trong phần 2 của bài báo, chúng tôi trình bày mô hình hai dải năng lượng có xét đến tương tác điện tử - phonon, và áp dụng gần đúng Hartree-Fock, là một trong số những phương pháp gần đúng tiêu biểu của lý thuyết trường trung bình, để rút ra hệ phương trình tự hợp cho tham số trật tự của trạng thái điện môi exciton. Phần 3 trình bày các kết quả tính số và thảo luận. Các kết luận của bài báo được trình bày trong phần 4.

* Tác giả liên hệ

Email: nguyenthihau@humg.edu.vn

2. Cơ sở lý thuyết và phương pháp nghiên cứu

Trong không gian xung lượng, Hamiltonian của mô hình hai dải năng lượng có xét đến tương tác điện tử - phonon được viết dưới dạng sau:

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} \quad (1)$$

trong đó: H_e mô tả thành phần không tương tác của hệ điện tử c trên dải dẫn và điện tử f trên dải hóa trị, có dạng:

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

với: $c_{\mathbf{k}}^\dagger (c_{\mathbf{k}})$ và $f_{\mathbf{k}}^\dagger (f_{\mathbf{k}})$ tương ứng là các toán tử sinh (hủy) của các điện tử c và điện tử f mang xung lượng \mathbf{k} . Ghép cặp điện tử $c-f$ tương đương với một trạng thái exciton của điện tử trên dải dẫn và lỗ trống trên dải hóa trị. Trong gần đúng liên kết chặt, các năng lượng kích thích điện tử c và f được cho bởi:

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

với: $\varepsilon^{c,f}$ là năng lượng trên một nút của điện tử c và điện tử f , $t^{c,f}$ là tích phân nhảy nút tương ứng của điện tử c và điện tử f , thể hiện độ linh động của các điện tử c, f ; $\gamma_{\mathbf{k}} = 2(\cos k_x + \cos k_y)$ là bước nhảy trong mạng tinh thể hai chiều và μ là thế hóa học.

H_{ph} mô tả hệ phonon không tương tác với năng lượng không tán sắc ω_0 :

$$H_{ph} = \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \quad (4)$$

trong đó: $b_{\mathbf{q}}^\dagger (b_{\mathbf{q}})$ là các toán tử sinh (hủy) phonon có xung lượng \mathbf{q} .

Số hạng cuối cùng trong phương trình (1) mô tả tương tác của hệ điện tử và phonon:

$$H_{e-ph} = \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} [c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} (b_{-\mathbf{q}}^\dagger + b_{\mathbf{q}}) + f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^\dagger + b_{-\mathbf{q}})] \quad (5)$$

với: g là hằng số tương tác điện tử - phonon và N là số nút mạng tinh thể.

Ở đây, chúng tôi giả thiết tại nhiệt độ đủ thấp, các cặp liên kết với xung lượng hữu hạn $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ có thể ngưng tụ. Điều này được thể hiện bởi giá trị khác không của $\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle$. Đại lượng này được gọi là tham số trật tự trạng thái EI, bởi nó biểu thị sự lai hóa giữa các điện tử c và điện tử f .

Tiếp theo, chúng tôi áp dụng lý thuyết trường trung bình để giải Hamiltonian (1). Để làm được điều đó, chúng tôi giới thiệu toán tử thăng giáng $\delta A = A - \langle A \rangle$ và viết lại toán tử tương tác điện tử - phonon dưới dạng như sau:

$$c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} (b_{-\mathbf{q}}^\dagger + b_{\mathbf{q}}) = \delta(c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}}) \delta(b_{-\mathbf{q}}^\dagger + b_{\mathbf{q}}) - \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle \langle b_{-\mathbf{q}}^\dagger + b_{\mathbf{q}} \rangle \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}} \\ + [c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \langle b_{-\mathbf{q}}^\dagger + b_{\mathbf{q}} \rangle + \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle (b_{-\mathbf{q}}^\dagger + b_{\mathbf{q}})] \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}} \quad (6)$$

Thay (6) vào (1), đồng thời thêm vào các trường Λ và h đặc trưng cho sự phá vỡ đối xứng tự phát:

$$\Lambda = \frac{g}{\sqrt{N}} \langle b_{-\mathbf{Q}}^\dagger + b_{-\mathbf{Q}} \rangle \quad (7)$$

$$h = \frac{g}{N} \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} + f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \quad (8)$$

Giả thiết sự thăng giáng là nhỏ, chúng tôi thu được Hamiltonian Hartree-Fock H_{HF} gồm phần điện tử và phần phonon như sau:

$$H_{HF} = \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}}) + \Lambda \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} + f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} + \sqrt{N} h (b_{-\mathbf{Q}}^\dagger + b_{-\mathbf{Q}}) \quad (9)$$

Phần điện tử được chéo hóa bằng phép biến đổi Bogoliubov với việc định nghĩa các toán tử giả hạt fermion như sau:

$$C_{\mathbf{ak}}^\dagger = \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger + \eta_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (10)$$

$$C_{\mathbf{bk}}^\dagger = \xi_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^\dagger - \eta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger \quad (11)$$

với các hệ số $\xi_{\mathbf{k}}$ và $\eta_{\mathbf{k}}$ được chọn sao cho thỏa mãn: $\xi_{\mathbf{k}}^2 + \eta_{\mathbf{k}}^2 = 1$

Phần phonon cũng được chéo hóa nhờ định nghĩa toán tử phonon mới:

$$B_{\mathbf{q}}^\dagger = b_{\mathbf{q}}^\dagger + \sqrt{N} \frac{h}{\omega_0} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}} \quad (12)$$

Hamiltonian trong phương trình (9) sau khi được chéo hóa hoàn toàn có dạng:

$$H_{dia} = \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}}^a C_{\mathbf{a}\mathbf{k}}^\dagger C_{\mathbf{a}\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}^b C_{\mathbf{b}\mathbf{k}}^\dagger C_{\mathbf{b}\mathbf{k}}) + \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} B_{\mathbf{q}}^\dagger B_{\mathbf{q}} \quad (13)$$

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

$$E_{\mathbf{k}}^{a/b} = \frac{1}{2} \left[(\varepsilon_{\mathbf{k}}^f + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^c) \mp \text{sgn}(\varepsilon_{\mathbf{k}}^f - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^c) W_{\mathbf{k}} \right] \quad (14)$$

với:

$$W_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}}^f - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^c)^2 + 4|\Lambda|^2} \quad (15)$$

Dạng chéo hóa của Hamiltonian trong phương trình (13) cho phép chúng ta xác định được tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton:

$$d_{\mathbf{k}} = \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle = -\Lambda \left[n_F(E_{\mathbf{k}}^a) - n_F(E_{\mathbf{k}}^b) \right] \frac{\text{sgn}(\varepsilon_{\mathbf{k}}^f - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^c)}{W_{\mathbf{k}}} \quad (16)$$

với $n_F(\varepsilon) = (e^{\beta\varepsilon} - 1)^{-1}$ là hàm phân bố Fermi-Dirac, trong đó $\beta = 1/T$ là nghịch đảo của nhiệt độ.

Từ đây ta có thể xác định được:

$$d = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^*) \quad (17)$$

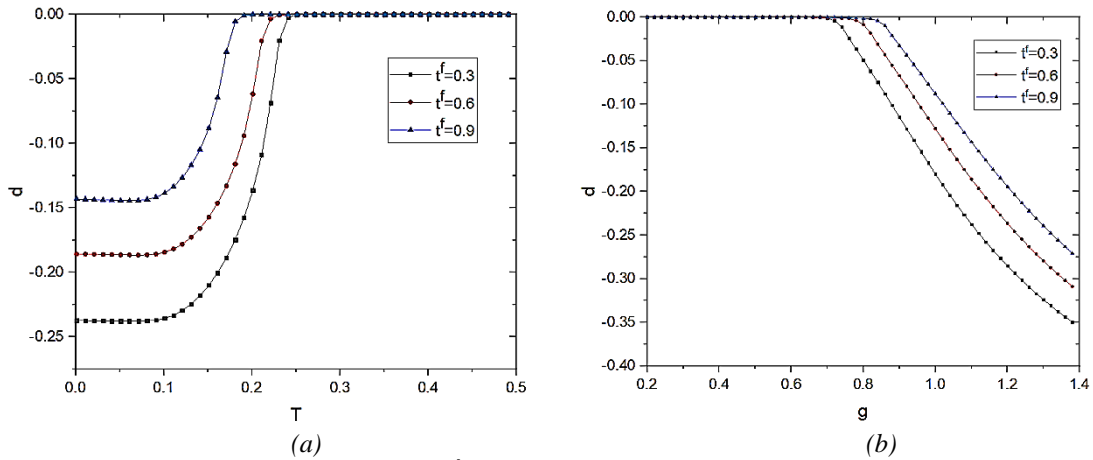
Đại lượng này có chứa số hạng lai hóa nên cũng được gọi là tham số trật tự trạng thái EI. Tham số trật tự khác không thể hiện hệ tồn tại trong trạng thái EI.

3. Kết quả và thảo luận

Trong phần này, chúng tôi trình bày kết quả tính số để thảo luận ảnh hưởng của độ linh động của điện tử f lên trạng thái EI trong mô hình hai dải năng lượng có xét đến tương tác điện tử - phonon. Từ một số giá trị cho trước của $\langle b_{\mathbf{Q}}^\dagger \rangle$ và $d_{\mathbf{k}}$, chúng tôi giải các phương trình tự hợp (7) và (14) – (17). Khi tham số trật tự d khác không, hệ tồn tại ở trạng thái EI và ngược lại, khi tham số trật tự bằng không, hệ tồn tại trong trạng thái plasma của điện tử và lỗ trống hoặc trạng thái bán kim loại.

Chúng tôi xét hệ hai chiều gồm $N = 100 \times 100$ nút mạng, và thực hiện tính số trong hệ đơn vị tự nhiên với $\hbar = c = k_B = 1$. Không mất tính tổng quát, chúng tôi chọn $t^c = 1$ là đơn vị của năng lượng, còn t^f luôn được chọn sao cho $t^f < t^c$ tức dải dẫn c rộng hơn dải hóa trị f thể hiện điện tử c linh động hơn điện tử f . Chúng tôi cố định $\omega_0 = 2.5$ và $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 1$ với sự xen phủ mạnh của hai dải năng lượng thể hiện hệ bán kim loại, còn thế hóa học μ được thay đổi để thỏa mãn điều kiện tổng mật độ điện tử c và điện tử f : $n^c + n^f = 1$ trong trạng thái lấp đầy một nửa.

Trước tiên, chúng tôi khảo sát sự hình thành trạng thái EI phụ thuộc vào nhiệt độ và hằng số tương tác điện tử - phonon ứng với một vài giá trị khác nhau của tích phân nhảy nút t^f (Hình 1).



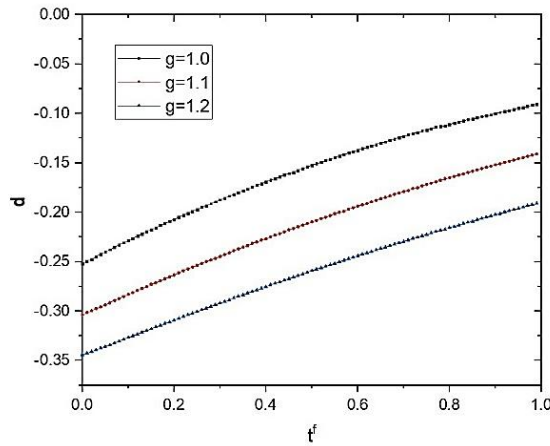
Hình 1. Tham số trật tự d phụ thuộc vào nhiệt độ (a) và hằng số tương tác điện tử - phonon; (b) ứng với một vài giá trị của t^f

Trên Hình 1a, chúng tôi biểu thị sự phụ thuộc của tham số trật tự d vào nhiệt độ ứng với một vài giá trị

của t^f khi cố định hằng số tương tác điện tử - phonon $g = 1.1$. Giản đồ cho thấy đối với một giá trị xác định của t^f thì tham số trật tự chỉ khác không khi nhiệt độ nhỏ hơn giá trị nhiệt độ tới hạn T_c . Chẳng hạn như, ứng với $t^f = 0.3$ thì giá trị nhiệt độ tới hạn $T_c \approx 0.25$. Ở đây, chúng tôi đã chọn $t^c = 1$ là đơn vị của năng lượng trong tính số nên giá trị nhiệt độ T_c này được tính theo đơn vị t^c . Giá trị của tham số trật tự giảm khi nhiệt độ tăng và bằng 0 ở nhiệt độ tới hạn T_c nên T_c được gọi là nhiệt độ chuyển pha trạng thái EI. Giá trị tới hạn T_c giảm khi tăng t^f . Khi $T \leq T_c$, tham số trật tự khác không thể hiện hệ ở trạng thái EI. Trong miền nhiệt độ thấp, d gần như không đổi, hay nói cách khác hệ ổn định ở trạng thái EI khi nhiệt độ thấp. Ngược lại, khi $T > T_c$ năng lượng nhiệt lớn làm phá hủy liên kết cặp điện tử $c-f$ nên hệ chuyển sang trạng thái plasma của điện tử. Sự phụ thuộc nhiệt độ của tham số trật tự d trong Hình 1a hoàn toàn phù hợp với các quan sát thực nghiệm gần đây trên vật liệu 1T-TiSe₂ (Monney và nnk, 2010). Thật vậy, trong vật liệu này, dữ liệu thực nghiệm cho thấy đáng chú ý sự phụ thuộc nhiệt độ của tham số trật tự có dạng tương tự như tham số trật tự BCS của siêu dẫn. Chính vì vậy, trạng thái EI trong vật liệu bán kim loại thường được quan sát thấy có dạng tương tự như trạng thái ngưng tụ của các cặp Cooper trong lý thuyết BCS. Từ các kết quả thu được ở Hình 1a, chúng tôi tiếp tục khảo sát sự phụ thuộc của tham số trật tự vào hằng số tương tác điện tử - phonon g tại nhiệt độ $T = 0$ trên Hình 1b. Hình 1b cho thấy đối với một giá trị xác định của t^f thì tham số trật tự tăng khi hằng số tương tác điện tử - phonon tăng. Tham số trật tự khác không khi hằng số tương tác điện tử - phonon lớn hơn một giá trị tới hạn g_c . Ví dụ, ứng với giá trị của $t^f = 0.3$ thì giá trị tới hạn của hằng số tương tác điện tử - phonon $g_c \approx 0.68$. Khi tăng t^f thì giá trị của g_c cũng tăng theo. Khi $g < g_c$ thì tham số trật tự bằng 0, khi đó hệ tồn tại trong trạng thái bán kim loại.

Các kết quả trên Hình 1 cho thấy, ứng với một giá trị xác định của $t^f < t^c$ hệ luôn tồn tại trong trạng thái EI khi $T \leq T_c$ và $g \geq g_c$. Khi nhiệt độ cao hoặc hằng số tương tác điện tử - phonon không đủ lớn ($g < g_c$) thì không thể thiết lập trạng thái liên kết điện tử $c-f$ hình thành exciton, do vậy trạng thái EI không tồn tại. Khi tăng t^f , cả Hình 1a và 1b đều cho thấy tham số trật tự giảm. Điều này khẳng định, nếu điện tử f càng linh động thì càng làm giảm khả năng kết cặp điện tử $c-f$ hình thành exciton, trạng thái EI vì vậy bị suy yếu.

Để thấy rõ hơn ảnh hưởng của mức độ linh động của điện tử f tới trạng thái EI, chúng tôi tiếp tục khảo sát sự phụ thuộc của tham số trật tự d vào t^f ứng với một vài giá trị khác nhau của hằng số tương tác điện tử - phonon tại nhiệt độ không (Hình 2).



Hình 2. Tham số trật tự d phụ thuộc vào t^f ứng với một vài giá trị của hằng số tương tác điện tử - phonon g

Hình 2 cho thấy tham số trật tự khác không trong toàn miền giới hạn của t^f . Ứng với một giá trị xác định đủ lớn của hằng số tương tác điện tử phonon, tham số trật tự giảm khi t^f tăng. Khi g tăng thì giá trị của tham số trật tự cũng tăng theo. Như vậy độ linh động của điện tử f rõ ràng cũng ảnh hưởng tới sự tồn tại trạng thái EI trong hệ. Nếu điện tử c càng linh động hơn điện tử f thì càng tăng khả năng ghép cặp của điện tử $c-f$ hình thành exciton và do đó tham số trật tự càng lớn. Giản đồ được biểu thị ở Hình 2 hoàn toàn phù hợp với kết quả thu được ở Hình 1.

4. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã áp dụng gần đúng Hartree-Fock để khảo sát ảnh hưởng của mức độ linh

động của điện tử lên trạng thái EI trong vật liệu bán kim loại thông qua mô hình hai dải năng lượng có xét đến tương tác điện tử - phonon. Các kết quả tính toán giải tích thu được hệ phương trình xác định tham số trật tự trạng thái EI. Từ các kết quả tính toán giải tích, chúng tôi đã thiết lập chương trình tính số để khảo sát sự phụ thuộc của tham số trật tự trạng thái EI vào nhiệt độ, hằng số tương tác điện tử - phonon khi thay đổi tích phân nhảy nút của điện tử f . Các kết quả tính số cho thấy các exciton trong hệ ngưng tụ khi nhiệt độ đủ thấp và hằng số tương tác điện tử - phonon có giá trị đủ lớn. Ở nhiệt độ thấp, ứng với một giá trị xác định của t^f , khi hằng số tương tác điện tử - phonon đủ lớn ($g \geq g_c$), hệ ổn định trong trạng thái EI. Khi hằng số tương tác điện tử - phonon không đủ lớn ($g < g_c$), không thể thiết lập trạng thái liên kết điện tử c - f hình thành exciton, do vậy hệ tồn tại trong trạng thái SM. Tăng nhiệt độ làm phá hủy trạng thái kết cặp điện tử c - f , trạng thái EI do vậy bị suy yếu được thể hiện bởi sự giảm giá trị của tham số trật tự. Khi nhiệt độ lớn hơn nhiệt độ tới hạn T_c , hệ chuyển sang trạng thái plasma của điện tử. Khi t^f càng lớn, tức điện tử f càng linh động thì nhiệt độ chuyển pha trạng thái EI và tham số trật tự trạng thái EI càng giảm, thể hiện trạng thái EI bị suy yếu. Những nghiên cứu kỹ lưỡng hơn về vai trò của độ linh động của điện tử lên trạng thái EI trong ảnh hưởng của cả tương tác Coulomb và tương tác điện tử - phonon sẽ được chúng tôi thực hiện trong tương lai.

Tài liệu tham khảo

- F. X. Bronold and H. Fehske, 2006. Possibility of an excitonic insulator at the semiconductor-semimetal transition. *Phys. Rev. B*, 74: 165107.
- H. Cercellier et al, 2007. Evidence for an excitonic insulator phase in 1T-TiSe₂. *Phys. Rev. Lett*, 99: 146403.
- B. Debnath, Y. Barlas, D. Wickramaratne, M. R. Neupane, and R. K. Lake, 2017. Exciton condensate in bilayer transition metal dichalcogenides: strong coupling regime. *Phys. Rev. B*, 96: 174504.
- K. Domon, T. Yamada, and Y. Ono, 2018. Excitonic phase diagram of the quasi-one-dimensional three-chain Hubbard model for semiconducting and semimetallic Ta₂NiSe₅. *J. Phys. Soc. Jpn*, 87: 054701.
- F. J. Di Salvo, D. E. Moncton, and J. V. Waszczak, 1976. Electronic properties and superlattice formation in the semimetal TiSe₂. *Phys. Rev. B*, 14: 4321.
- M. Förg, L. Colombier, R. K. Patel, J. Lindlau, A. D. Mohite, H. Yamaguchi, D. Hunger, A. Högele, 2019. Cavity-control of bright and dark interlayer excitons in van der Waals heterostructures. *Nat. Commun*, 10: 3697.
- K. Hamada, T. Kaneko, S. Miyakoshi, and Y. Ohta, 2017. Excitonic insulator state of the extended Falicov-Kimball model in the cluster dynamical impurity approximation. *J. Phys. Soc. Jpn*, 86: 074709.
- D. Ihle, M. Pfafferoth, E. Burovski, F. X. Bronold, and H. Fehske, 2008. Bound state formation and nature of the excitonic insulator phase in the extended Falicov-Kimball model. *Phys. Rev. B*, 78: 193103.
- T. Kaneko, T. Toriyama, T. Konishi, and Y. Ohta, 2013. Orthorhombic-tomonoclinic phase transition of Ta₂NiSe₅ induced by the Bose-Einstein condensation of excitons. *Phys. Rev. B*, 87: 035121.
- F. Katsch, M. Selig, A. Knorr, 2020. Exciton-Scattering-Induced Dephasing in Two-Dimensional Semiconductors. *Phys. Rev. Lett*, 124: 257402.
- A. Kogar, M. S. Rak, S. Vig, A. A. Husain, F. Flicker, Y. I. Joe, L. Venema, G. J. MacDougall, T. C. Chiang, E. Fradkin, J. van Wezel, and P. Abbamonte, 2017. Signatures of exciton condensation in a transition metal dichalcogenide. *Science*, 358: 1314-1317.
- Y. F. Lu et al, 2017. Zero-gap semiconductor to excitonic insulator transition in Ta₂NiSe₅. *Nat. Commun*, 8: 14408.
- C. Monney, E. F. Schwier, M. G. Garnier, N. Mariotti, C. Didiot, H. Cercellier, J. Marcus, H. Berger, A. N. Titov, H. Beck, and P. Aebi, 2010. Probing the exciton condensate phase in 1T-TiSe₂ with photoemission. *New J. Phys*, 12: 125019.
- C. Monney et al, 2010. Probing the exciton condensate phase in 1T-TiSe₂ with photoemission. *New J. Phys*, 12: 125019.
- C. Monney, E. F. Schwier, M. G. Garnier, N. Mariotti, C. Didiot, H. Beck, P. Aebi, C. Cercellier, J. Marcus, C. Battaglia, H. Berger, and A. N. Titov, 2010. Temperature-dependent photoemission on 1T-TiSe₂: Interpretation within the exciton condensate phase model. *Phys. Rev. B*, 81: 155104.
- N. F. Mott, 1961. The transition to the metallic state. *Philos. Mag*, 6: 287-309.
- A. Nakano, T. Hasegawa, S. Tamura, N. Katayama, S. Tsutsui, H. Sawa, 2018. Electron-Phonon Coupling Mode in Excitonic Insulator. *Phys. Rev. B*, 98: 045139.
- N. V. Phan, H. Fehske, and K. W. Becker, 2011. Excitonic resonances in the 2D extended Falicov-Kimball model. *Europhys. Lett*, 95: 17006.

K. Seki, Y. Wakisaka, T. Kaneko, T. Toriyama, T. Konishi, T. Sudayama, N. L. Saini, M. Arita, H. Namatame, M. Taniguchi, N. Katayama, M. Nohara, H. Takagi, T. Mizokawa, Y. Ohta, 2014. Excitonic Bose-Einstein condensation in Ta₂NiSe₅ above room temperature. *Phys. Rev. B*, 90: 155116.

G. Wang, A. Chernikov, M. M. Glazov, T. F. Heinz, X. Marie, T. Amand, and B. Urbaszek, 2018. Colloquium: Excitons in atomically thin transition metal dichalcogenides. *Rev. Mod. Phys.*, 90: 021001.

Y. Wakisaka et al, 2009. Excitonic insulator state in Ta₂NiSe₅ probed by photoemission spectroscopy. *Phys.Rev. Lett*, 103: 026402.

B. Zenker, D. Ihle, F. X. Bronold, and H. Fehske, 2010. On the existence of the excitonic insulator phase in the extended Falicov-Kimball model: a SO(2)invariant slave-boson approach. *Phys. Rev. B*, 81: 115122.

ABSTRACT

Influence of the electronic mobility on the excitonic insulator state in semimetal materials

Do Thi Hong Hai¹, Nguyen Thi Hau^{1,*}

¹ *Hanoi University of Mining and Geology*

In this paper, we investigate effects of the electronic mobility on the excitonic insulator state in semimetal materials through the two-band model in the presence of electron – phonon interaction. We have delived a set of self-consistent equations determining the order parameter of the excitonic insulator state by applying the Hartree-Fock approximation. Our numerical results confirm the role of the f-electron mobility in the formation of the excitonic insulator state at sufficiently low temperature when the electron-phonon interaction is large enough.

Keywords: Hartree-Fock approximation; semimetal; the two-band model in the presence of electron-phonon interaction; excitonic insulator