



TUYỂN TẬP BÁO CÁO HỘI NGHỊ TOÀN QUỐC

KHOA HỌC TRÁI ĐẤT VÀ TÀI NGUYÊN VỚI PHÁT TRIỂN BỀN VỮNG

Hà Nội, 11 - 11 - 2022

ERSD 2022



NHÀ XUẤT BẢN GIAO THÔNG VẬN TẢI

Thông kê R trong bài toán kiểm định tham số <i>Phạm Ngọc Anh</i>	1106
The experience of organizing EFL online teaching <i>Nguyen Thi Nguyet Anh</i>	1111
Đặc trưng dao động cưỡng bức của hệ lò xo - khối lượng trong mặt phẳng có tính đến ma sát với hiệu ứng Stribeck <i>Phạm Ngọc Chung, Nguyễn Như Hiếu</i>	1117
Tổng quan về một số phương pháp chế tạo vật liệu bán dẫn hệ thấp chiều <i>Nguyễn Xuân Chung</i>	1123
Nghiên cứu tổng hợp và đặc trưng tính chất vật liệu hydroxit lớp kép Zn-Al <i>Công Tiến Dũng, Phương Thảo, Lê Thị Phương Thảo</i>	1128
Tổng hợp và nghiên cứu khả năng bảo vệ chống ăn mòn thép CT3 của màng phủ polypyrrole trong môi trường axit sulfuric <i>Phạm Tiến Dũng, Nguyễn Thị Kim Thoa, Hà Mạnh Hùng</i>	1134
Nghiên cứu khả năng hấp phụ Ni ²⁺ bằng hydroxyapatit tổng hợp <i>Lê Thị Duyên, Hoàng Thanh Bình, Trần Thị Thu Hương, Nguyễn Việt Hùng, Lê Thị Phương Thảo, Võ Thị Hạnh, Đỗ Thị Hải, Nguyễn Thị Thu Hiền, Phạm Tiến Dũng, Công Tiến Dũng, Đinh Thị Mai Thanh</i>	1141
Mô hình hóa và thiết lập hệ phương trình chuyển động cho robot song song 3RRR có khâu đàn hồi <i>Đinh Công Đạt</i>	1147
Nghiên cứu quy trình chiết xuất L-tetrahydropalmitine trong cây Bình Vôi chữa bệnh mất ngủ <i>Nguyễn Thu Hà, Vũ Duy Thịnh</i>	1153
Common errors in using English collocations by students at Hanoi University of Mining and Geology <i>Le Thi Thuy Ha, Dang Thanh Mai</i>	1157
Tính chất quang học của hệ exciton trong trạng thái ngưng tụ <i>Đỗ Thị Hồng Hải, Nguyễn Xuân Chung, Hồ Quỳnh Anh</i>	1161
Nghiên cứu khả năng xử lý ion Ni ²⁺ trong nước bằng vật liệu tự nhiên sericit ở mỏ Sơn Bình, Hà Tĩnh <i>Võ Thị Hạnh, Lê Thị Duyên, Nguyễn Mạnh Hà, Đỗ Thị Hải, Nguyễn Thị Thanh Thảo, Bùi Hoàng Bắc</i>	1167
Ước lượng xác suất đuôi của nghiệm mô hình CIR với nhiễu là chuyển động Brown phân thứ <i>Nguyễn Thu Hằng</i>	1173
Xây dựng thuật toán tiến cho bài toán quan sát đa mục tiêu MTT sử dụng HMM không thuần nhất <i>Nguyễn Thị Hằng</i>	1178
Ảnh hưởng của áp suất ngoài lên sự hình thành trạng thái điện môi exciton trong các hợp chất đất hiếm chalcogenide <i>Nguyễn Thị Hậu, Đỗ Thị Hồng Hải</i>	1184
Mối quan hệ giữa Glucocorticoid và tế bào tự diệt NK <i>Vũ Thị Minh Hồng, Phạm Tiến Dũng</i>	1190

Tính chất quang học của hệ exciton trong trạng thái ngưng tụ

Đỗ Thị Hồng Hải*, Nguyễn Xuân Chung, Hồ Quỳnh Anh
Bộ môn Vật lý, Trường Đại học Mở - Địa chất

TÓM TẮT

Trong bài báo này, tính chất quang học của hệ exciton trong trạng thái ngưng tụ dựa trên dấu hiệu của độ dẫn quang đã được nghiên cứu thông qua mô hình Falicov-Kimball mở rộng có tương tác điện tử - phonon. Sử dụng gần đúng Hartree-Fock, chúng tôi rút ra hệ phương trình tự hợp xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton. Trên cơ sở lý thuyết Kubo về phản hồi quang học tuyến tính, biểu thức giải tích của độ dẫn quang đã được tìm thấy. Kết quả tính số khảo sát dấu hiệu của độ dẫn quang đã khẳng định ảnh hưởng của áp suất ngoài và nhiệt độ lên trạng thái ngưng tụ exciton. Các kết quả nghiên cứu này rất đáng giá trong việc hiểu rõ sự hình thành và tính ổn định của trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ.

Từ khóa: Độ dẫn quang, ngưng tụ exciton, mô hình Falicov-Kimball, tương tác điện tử - phonon.

1. Đặt vấn đề

Trong bán kim loại hay bán dẫn có khe năng lượng hẹp, các lỗ trống ở dải hoá trị có thể liên kết với các điện tử ở dải dẫn nhờ lực hút tĩnh điện Coulomb hình thành nên giả hạt boson gọi là exciton. Ở nhiệt độ đủ thấp với mật độ đủ lớn, những exciton này có thể ngưng tụ trong một trạng thái lượng tử mới (Moskalenko và Snoke, 2000). Tùy theo cường độ thế tương tác Coulomb mạnh hay yếu mà exciton có thể ngưng tụ trong trạng thái BEC (Bose-Einstein condensed) hay BCS (John Bardeen - Leon Cooper - Robert Schrieffer) tương tự như trạng thái siêu dẫn của các cặp Cooper. Trạng thái ngưng tụ của các exciton đã được đề xuất về mặt lý thuyết từ hơn 60 năm trước (Mott, 1961). Với khối lượng hiệu dụng nhỏ, nhiệt độ tới hạn cho chuyển pha trạng thái ngưng tụ của exciton có thể đạt được ở nhiệt độ phòng. Vì vậy, với tiềm năng ứng dụng trong công nghệ, việc khảo sát kỹ lưỡng các yếu tố ảnh hưởng đến chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton trong các hệ vật liệu và tính chất động học của trạng thái ngưng tụ đang rất được quan tâm nghiên cứu.

Trong nghiên cứu lý thuyết về sự hình thành và ngưng tụ của exciton, người ta thường dùng mô hình hai dải năng lượng, trong đó mô hình Falicov-Kimball mở rộng (Extended Falicov-Kimball model – EFKM) là mô hình tiêu biểu và thường được sử dụng nhiều nhất (Ninh, Q.-H., Phan, V.-N, 2021; Zenker, B. và nnk, 2010; Kaneko, T. và nnk, 2013). Mô hình EFKM là mô hình có tính tới sự nhảy trực tiếp điện tử dải c và dải f và thừa nhận sự kết cặp của điện tử c với điện tử f thông qua tương tác Coulomb. Với mô hình này, người ta xem như ghép cặp điện tử $c - f$ tương đương với một trạng thái exciton. Tuy nhiên, khi sử dụng mô hình này, tương tác giữa điện tử với phonon đã hoàn toàn bị bỏ qua. Trong khi đó, tương tác này có vai trò quan trọng trong việc hình thành và ngưng tụ của exciton, đặc biệt là trong các kim loại chuyển tiếp. Chẳng hạn như, trong vật liệu $\text{TmSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$, dưới sự hỗ trợ của phonon, một trạng thái liên kết exciton của lỗ trống $4f$ và điện tử $5d$ có thể được tạo thành. Tại nhiệt độ đủ thấp và áp suất trong khoảng từ 5-13kbar, trạng thái ngưng tụ exciton có thể được thiết lập (Wachter và nnk, 2004; Wachter, 2018). Hay trong vật liệu Ta_2NiSe_5 , ảnh hưởng của tương tác điện tử - phonon mạnh lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ exciton cũng đã được khẳng định (Volkov, P. A và nnk, 2021; Zhang, Y-S. và nnk, 2021). Do vậy, tương tác giữa điện tử với phonon cần phải được đưa vào tính toán và xem xét kỹ lưỡng.

Trong một số nghiên cứu trước, chúng tôi đã khảo sát trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình EFKM có tương tác điện tử - phonon (Thi-Hong-Hai-Do và nnk, 2017; Thi-Hong-Hai-Do và nnk, 2019; Đỗ Thị Hồng Hải và Phan Văn Nhâm, 2018). Trong đó, chúng tôi đã thiết lập giản đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton của mô hình cùng với thảo luận kịch bản giao nhau BCS-BEC của các trạng thái ngưng tụ dưới ảnh hưởng của nhiệt độ, thế tương tác Coulomb và tương tác điện tử - phonon thông qua nghiên cứu tính chất của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ. Tuy nhiên, một số kết quả nghiên cứu gần đây về độ dẫn quang trên vật liệu Ta_2NiSe_5 đã khẳng định exciton hình thành trước khi ngưng tụ, ngay cả khi hệ ở trạng thái bán kim loại (Sugimoto, K. và nnk, 2018; Lee, Jinwon và nnk, 2019). Điều này hoàn toàn trái ngược với quan niệm trước đó về sự hình thành và ngưng tụ của exciton (Bronold, F. X. and Fehske, H., 2006). Do đó, để có thể

* Tác giả liên hệ

Email: dothihonghai@humg.edu.vn

mô tả chi tiết hơn chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ, cần phải nghiên cứu kỹ lưỡng các tính chất động học của sự ngưng tụ đặc biệt ở lân cận điểm chuyển pha như độ dẫn quang, hàm cảm ứng exciton động, ...

Trong bài báo này, chúng tôi tập trung nghiên cứu ảnh hưởng của nhiệt độ và áp suất ngoài lên trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình EFKM có sự hiện diện của phonon thông qua phân tích dấu hiệu của độ dẫn quang trong trạng thái ngưng tụ. Sử dụng lý thuyết Kubo về phản hồi quang học tuyến tính, biểu thức giải tích của độ dẫn quang đã được tìm thấy. Tính chất quang học của hệ được suy ra từ dấu hiệu của độ dẫn quang sẽ cung cấp nhiều thông tin có giá trị về sự ngưng tụ của exciton trong hệ. Trên cơ sở đó, chúng ta có thể hiểu được bản chất động học của sự chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ.

Bài báo được chia thành 4 phần. Trong đó, chúng tôi trình bày mô hình EFKM có tương tác điện tử - phonon và áp dụng gần đúng Hartree-Fock cho mô hình để tìm ra phương trình tự hợp xác định các giá trị kì vọng trong phần 2. Cũng trong phần này, biểu thức giải tích của độ dẫn quang đã được suy ra dựa trên lý thuyết Kubo. Bằng phương pháp tính số giải hệ phương trình tự hợp, các giá trị kì vọng và giá trị cụ thể của độ dẫn quang được tìm thấy. Kết quả tính số và thảo luận được trình bày trong phần 3 của bài báo. Cuối cùng, phần 4 là kết luận của bài báo.

2. Mô hình và tính toán lý thuyết

Để khảo sát trạng thái ngưng tụ exciton, chúng ta xuất phát từ Hamiltonian của mô hình EFKM có tương tác điện tử - phonon được viết trong không gian xung lượng như sau

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{int} \quad (1)$$

trong đó, thành phần không tương tác của hệ phonon và hệ điện tử là

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} (\omega_0 p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}}) \quad (2)$$

với $p_{\mathbf{k}}^\dagger(p_{\mathbf{k}})$; $c_{\mathbf{k}}^\dagger(c_{\mathbf{k}})$ và $f_{\mathbf{k}}^\dagger(f_{\mathbf{k}})$ lần lượt là các toán tử sinh (hủy) phonon, điện tử c trên dải dẫn và điện tử f trên dải hóa trị mang xung lượng \mathbf{k} . Trong gần đúng liên kết chặt, năng lượng tán sắc của 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 ; $t^{c/f}$ là tích phân nhảy nút. Trong mạng vuông hai chiều với hằng số mạng $a = 1$, bước nhảy trong mạng tinh thể là $\gamma_{\mathbf{k}} = 2(\cos k_x + \cos k_y)$ và μ là thế hóa học. Số hạng còn lại trong Hamiltonian (1) mô tả phần tương tác Coulomb của hệ điện tử và tương tác của hệ điện tử với phonon

$$\mathcal{H}_{int} = \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} + \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} [c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} (p_{-\mathbf{q}}^\dagger + p_{\mathbf{q}}) + f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (p_{\mathbf{q}}^\dagger + p_{-\mathbf{q}})] \quad (5)$$

với U là cường độ thế tương tác Coulomb giữa điện tử c và điện tử f , g là hằng số tương tác điện tử - phonon và N là số nút mạng tinh thể.

Bỏ qua các số hạng vô cùng bé và hằng số trong gần đúng Hartree-Fock, Hamiltonian trong phương trình (1) được viết lại như sau

$$\mathcal{H}^{HF} = \mathcal{H}_e^{HF} + \mathcal{H}_{ph}^{HF} \quad (6)$$

trong đó phần điện tử

$$\mathcal{H}_e^{HF} = \sum_{\mathbf{k}} (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}}) + \delta \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} + f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \quad (7)$$

với năng lượng tán sắc tái chuẩn hóa của các điện tử

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{c/f} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{c/f} + U n^{f/c} \quad (8)$$

ở đây, $n^c = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle$ và $n^f = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle$ lần lượt là mật độ điện tử c và mật độ điện tử f . Phần điện tử này được chéo hóa bằng cách sử dụng phép biến đổi Bogoliubov (Bogoliubov và nnk, 1959) với các toán tử giả hạt fermion $a_{1\mathbf{k}}$ và $a_{2\mathbf{k}}$

$$a_{1\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \eta_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \quad (9)$$

$$a_{2\mathbf{k}} = -\eta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \quad (10)$$

Còn phần phonon

$$\mathcal{H}_{ph}^{MF} = \omega_0 \sum_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} + \sqrt{N} \Delta (p_{-\mathbf{q}}^\dagger + p_{-\mathbf{q}}) \quad (11)$$

được chéo hóa bằng việc định nghĩa toán tử phonon mới $P_{\mathbf{k}}$. Trong công thức (7) và (11), các trường thêm vào

$$\delta = -\frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \delta_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{g}{\sqrt{N}} \langle p_{-\mathbf{q}}^\dagger + p_{-\mathbf{q}} \rangle \quad (12)$$

$$\Delta = \frac{g}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \delta_{\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{k}}^* \rangle \quad (13)$$

được xem là các tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton do chứa số hạng $\langle \delta_{\mathbf{k}} \rangle = \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle$ biểu thị sự lai hóa của điện tử c và điện tử f . Tham số trật tự khác không thể hiện hệ tồn tại trong trạng thái ngưng tụ exciton. Thông qua khảo sát tính chất của tham số trật tự, sự hình thành và ngưng tụ của exciton đã được chúng tôi nghiên cứu kỹ lưỡng trong các công trình (Thi-Hong-Hai-Do và nnk, 2017; Thi-Hong-Hai-Do và nnk, 2019; Đỗ Thị Hồng Hải và Phan Văn Nhâm, 2018).

Kết quả ta thu được Hamiltonian chéo hóa hoàn toàn viết dưới dạng toàn phương của các toán tử sinh và hủy như sau:

$$\mathcal{H}_{dia} = \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}}^1 a_{1\mathbf{k}}^\dagger a_{1\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}^2 a_{2\mathbf{k}}^\dagger a_{2\mathbf{k}} + \omega_0 p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}}) \quad (14)$$

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

$$E_{\mathbf{k}}^{1,2} = \frac{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c \mp \frac{\text{sgn}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c)}{2} \Gamma_{\mathbf{k}}}{2} \quad (15)$$

với:

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = \left[(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c)^2 + 4|\delta|^2 \right]^{1/2} \quad (16)$$

Sử dụng Hamiltonian trong phương trình (14), chúng ta thu được:

$$\langle \delta_{\mathbf{k}} \rangle = [n_F(E_{\mathbf{k}}^2) - n_F(E_{\mathbf{k}}^1)] \text{sgn}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c) \frac{\delta}{\Gamma_{\mathbf{k}}} \quad (17)$$

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

$$\xi_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \text{sgn}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c) \frac{(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c)}{\Gamma_{\mathbf{k}}} \right] \quad (18)$$

$$\eta_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \text{sgn}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c) \frac{(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c)}{\Gamma_{\mathbf{k}}} \right] \quad (19)$$

Trong nghiên cứu này, chúng tôi khảo sát tính chất quang học của hệ exciton trong trạng thái ngưng tụ thông qua phân tích tính chất của độ dẫn quang. Trong lý thuyết phản hồi tuyến tính, công thức Kubo cho độ dẫn quang được viết dưới dạng sau (Bruus, H. and Flensberg, K., 2004):

$$\sigma(\omega) = \frac{i}{\omega N^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle \langle \mathbf{j}^\dagger(\mathbf{k}) | \mathbf{j}(\mathbf{k}') \rangle \rangle_{\mathcal{H}} \quad (20)$$

Ở đây, $\langle \langle \mathbf{j}^\dagger(\mathbf{k}) | \mathbf{j}(\mathbf{k}') \rangle \rangle_{\mathcal{H}}$ chính là hàm Green hai hạt đối với Hamiltonian \mathcal{H} và toán tử dòng phụ thuộc xung lượng. Với hệ exciton được mô tả bởi Hamiltonian trong phương trình (1), toán tử dòng có dạng:

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}) = v_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \quad (21)$$

trong đó:

$$v_{\mathbf{k}}^{c/f} = \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}^{c/f}}{\partial \mathbf{k}} = -t^{c/f} \frac{\partial \gamma_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \quad (22)$$

là vận tốc của các điện tử c/f . Sử dụng phép biến đổi Bogoliubov (9) và (10), ta có thể biểu diễn toán tử dòng qua các toán tử giả hạt fermion $a_{1\mathbf{k}}$ và $a_{2\mathbf{k}}$. Sử dụng Hamiltonian chéo hóa ở phương trình (14), viết phương trình chuyển động cho hàm Green hai hạt, cuối cùng ta tìm được phần thực của độ dẫn quang:

$$\sigma(\omega) = \frac{\pi}{\omega N} \sum_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k}}^2 \xi_{\mathbf{k}}^2 (v_{\mathbf{k}}^c - v_{\mathbf{k}}^f)^2 [n_F(E_{\mathbf{k}}^1) - n_F(E_{\mathbf{k}}^2)] [\delta(\omega + E_{\mathbf{k}}^1 - E_{\mathbf{k}}^2) - \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^1 + E_{\mathbf{k}}^2)] \quad (23)$$

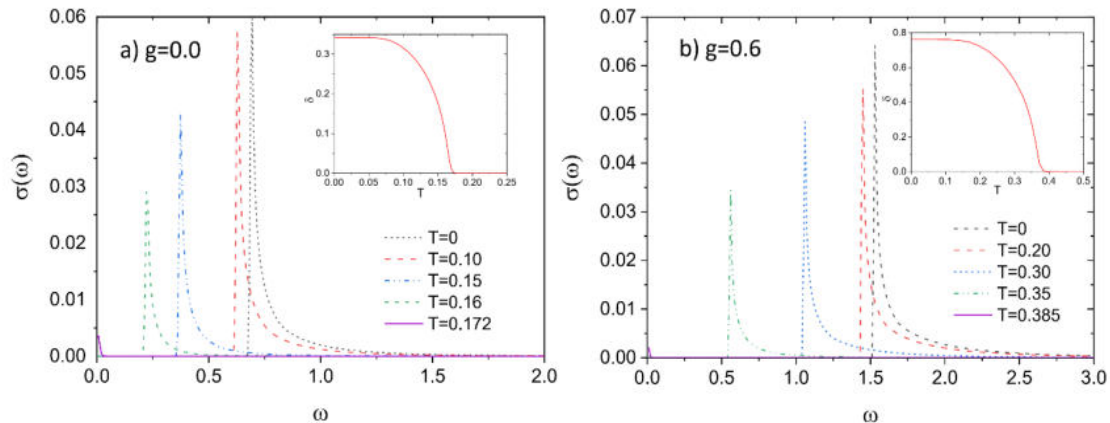
Như vậy, bằng việc giải các phương trình (8), (12) và (17), chúng ta có thể xác định được các giá trị kỳ vọng, từ đó tìm được giá trị của phần thực độ dẫn quang theo phương trình (23).

3. Kết quả tính số và thảo luận

Để phân tích chi tiết tính chất quang học của hệ exciton trong trạng thái ngưng tụ, trong phần này chúng tôi biểu thị các kết quả tính số độ dẫn quang được xác định bởi phương trình (23). Để làm được điều đó, chúng tôi thiết lập chương trình tính số giải tự hợp các phương trình (8), (12) và (17) để xác định các giá trị kỳ vọng. Trong tính toán số, chúng tôi chọn $t^c = 1$ là đơn vị của năng lượng và cố định $t^f = -0.3$ tương ứng với $|t^f| < t^c$ thể hiện các lỗ trống ở dải hóa trị kém linh động hơn các điện tử ở dải dẫn. Việc lựa chọn giá trị của các tham số này hoàn toàn phù hợp với trường hợp exciton khe trực tiếp (Brydon, P. M. R., 2008; Zenker, B. và nnk, 2010). Khi đó, tất cả các đại lượng khác đều được tính theo đơn vị của t^c . Trạng thái

ngưng tụ exciton thực tế có thể quan sát được trong các hệ có số chiều khác nhau. Những tính toán lý thuyết trong nghiên cứu này dựa trên cơ sở của lý thuyết trường trung bình nên kết quả thu được không phụ thuộc đáng kể vào số chiều của hệ. Do đó, để tính toán số, chúng tôi chọn hệ hai chiều gồm $N = 500 \times 500$ nút mạng và thể hóa μ được thay đổi sao cho thỏa mãn trường hợp lấp đầy một nửa, tức là tổng mật độ điện tử: $n^f + n^c = 1$. Trong các nghiên cứu trước đó, chúng tôi đã khẳng định exciton ngưng tụ trong một khoảng giá trị giới hạn của thể tương tác Coulomb. Chính vì vậy, trong nghiên cứu này, chúng tôi lựa chọn thể tương tác Coulomb $U = 3.0$ đủ lớn để có thể thiết lập trạng thái ngưng tụ exciton. Trong nghiên cứu gần đây, chúng tôi cũng đã khẳng định các exciton xung lượng không thuận lợi nhất trong việc thiết lập pha ngưng tụ nhiệt độ thấp (Thi-Hong-Hai Do and Van-Nham Phan, 2022). Điều này cũng hoàn toàn phù hợp với trạng thái của các exciton được quan sát gần đây trong vật liệu Ta_2NiSe_5 (Volkov, P. A. và nnk, 2021; Zhang, Y-S. và nnk, 2021). Do đó, trong nghiên cứu này, chúng tôi chỉ xét trạng thái ngưng tụ của các exciton xung lượng không để thảo luận về tính chất quang học của hệ exciton trong trạng thái ngưng tụ.

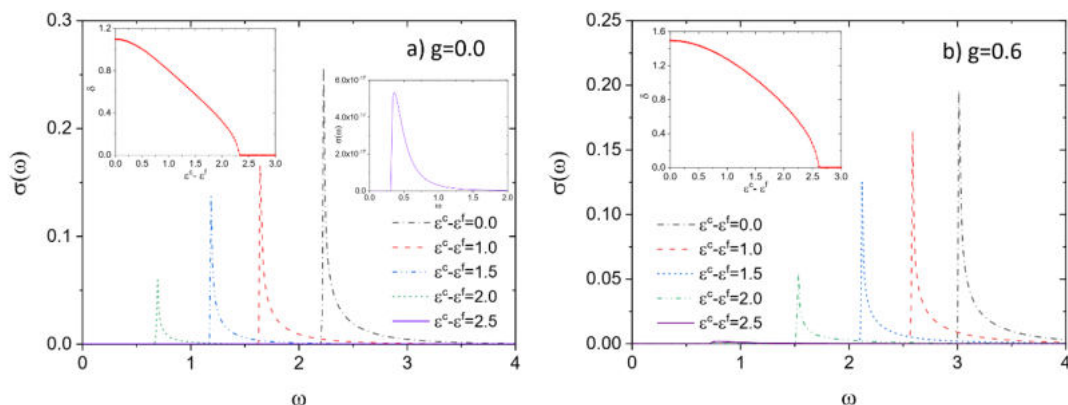
Trước tiên, chúng tôi xem xét sự ổn định của trạng thái ngưng tụ exciton thông qua phân tích sự phụ thuộc nhiệt độ của độ dẫn quang. Phần thực của độ dẫn quang đại diện cho hấp thụ quang học và cung cấp thông tin về sự hình thành các exciton trong hệ. Trên Hình 1, chúng tôi biểu thị phần thực của độ dẫn quang $\sigma(\omega)$ ở các nhiệt độ khác nhau khi $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 2.0$ ứng với hai giá trị của hằng số tương tác điện tử - phonon. Ở nhiệt độ thấp, do tương tác Coulomb $U = 3.0$ đủ lớn nên sự lai hóa giữa các điện tử trên dải dẫn và các lỗ trống trên dải hóa trị có thể được hình thành và trạng thái ngưng tụ exciton được thiết lập. Điều đó được biểu thị bằng đỉnh sắc nét trong quang phổ độ dẫn quang tại một tần số nhất định $\omega_c = 2\delta$ hay giá trị khác không của tham số trật tự exciton δ (xem phần hình nhỏ ở góc bên phải mỗi hình). Khi $\omega < \omega_c$, độ dẫn quang $\sigma(\omega)$ hoàn toàn bằng không. Tăng nhiệt độ, năng lượng nhiệt lớn làm phá hủy trạng thái ghép cặp điện tử-lỗ trống. Do đó, đỉnh của phổ độ dẫn quang di chuyển sang trái tương ứng với sự giảm giá trị của tham số trật tự và trọng lượng phổ giảm đáng kể. Điều đó có nghĩa trạng thái ngưng tụ exciton bị suy yếu. Ở nhiệt độ đủ cao, tất cả các cặp điện tử-lỗ trống đều bị phá hủy và hệ tồn tại trong trạng thái plasma của điện tử và lỗ trống. Do đó, tham số trật tự bằng không và độ dẫn quang có dạng Drude như trong trạng thái kim loại thông thường (xem đường liền nét ứng với $T_c = 0.172$ trong Hình 1a và $T_c = 0.385$ trong Hình 1b). Giá trị nhiệt độ này được xem là nhiệt độ tới hạn cho chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton. Hình 1 cũng cho thấy ảnh hưởng đáng kể của tương tác điện tử - phonon lên trạng thái ngưng tụ exciton. Thật vậy, khi không có tương tác điện tử - phonon ($g = 0$), Hình 1a cho thấy tần số ứng với đỉnh của phổ độ dẫn quang hay tần số của ánh sáng kích thích có giá trị nhỏ hơn so với khi có tương tác điện tử - phonon ($g = 0.6$ trong Hình 1b). Giá trị nhiệt độ tới hạn cho chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton cũng tăng lên khi có sự hiện diện của tương tác điện tử - phonon.



Hình 1. Phần thực của độ dẫn quang $\sigma(\omega)$ với các giá trị khác nhau của nhiệt độ T khi $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 2.0$ ứng với hai giá trị của hằng số tương tác điện tử - phonon $g = 0$ (a) và $g = 0.6$ (b). Hình nhỏ ở góc bên phải mỗi hình biểu thị sự phụ thuộc nhiệt độ của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ δ .

Tiếp theo, để nghiên cứu ảnh hưởng của áp suất bên ngoài lên tính chất quang học của trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ, chúng tôi biểu thị trên Hình 2 phần thực của độ dẫn quang $\sigma(\omega)$ với các giá trị khác nhau của hiệu hai mức năng lượng tại nút của điện tử $\varepsilon^c - \varepsilon^f$ ở nhiệt độ bằng không ứng với hai giá trị của hằng số tương tác điện tử - phonon. Hiệu hai mức năng lượng $\varepsilon^c - \varepsilon^f$ này đại diện cho sự xen phủ giữa các dải dẫn và hóa trị không tương tác, thể hiện tác động của áp suất bên ngoài lên hệ. Thật vậy, tại $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 0$, dải dẫn và dải hóa trị xen phủ mạnh tương ứng với áp suất bên ngoài lớn tác dụng lên hệ. Trong trường hợp này, độ dẫn quang biểu thị một đỉnh sắc nét với trọng lượng quang phổ cao và đột ngột giảm xuống tại

tần số tới hạn ω_c . Tăng $\varepsilon^c - \varepsilon^f$ sao cho dải hóa trị di chuyển ra xa dải dẫn tức là áp suất bên ngoài tác động lên hệ giảm thì vị trí đỉnh của độ dẫn quang dịch chuyển sang trái tương ứng với sự giảm dần ω_c . Sự giảm trọng lượng phổ khi tăng $\varepsilon^c - \varepsilon^f$ cũng cho thấy sự suy giảm của lai hóa điện tử-lỗ trống do sự giảm áp suất bên ngoài (xem các hình nhỏ bên trái). Đặc biệt, ở $\varepsilon^c - \varepsilon^f$ rất cao, chẳng hạn tại $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 2.5$, hai dải năng lượng tách xa nhau, hệ ở trạng thái bán dẫn thông thường và phản hồi quang dường như không đáng kể (xem hình nhỏ bên phải của Hình 2a và đường liền nét trong Hình 2b). So sánh Hình 2a và 2b, chúng ta một lần nữa khẳng định vai trò của tương tác điện tử - phonon trong sự ổn định của trạng thái ngưng tụ exciton. Khi tương tác điện tử - phonon đủ lớn ($g = 0.6$), tần số ứng với đỉnh của phổ độ dẫn quang hay tần số của ánh sáng kích thích lớn hơn so với khi không có tương tác điện tử - phonon ($g = 0$). Điều này cũng có nghĩa lai hóa điện tử-lỗ trống được tăng cường khi có sự hiện diện của tương tác điện tử-phonon. Áp suất tới hạn cho chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton cũng tăng lên khi có sự hỗ trợ của phonon.



Hình 2. Phần thực của độ dẫn quang $\sigma(\omega)$ với các giá trị khác nhau của hiệu năng lượng tại nút của điện tử $\varepsilon^c - \varepsilon^f$ tại nhiệt độ không ứng với hai giá trị của hằng số tương tác điện tử - phonon $g = 0$ (a) và $g = 0.6$ (b). Hình nhỏ ở góc bên trái mỗi hình biểu thị tham số trật tự trạng thái ngưng tụ δ như một hàm của $\varepsilon^c - \varepsilon^f$. Hình nhỏ bên phải của Hình a biểu thị $\sigma(\omega)$ khi $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 2.5$.

4. Kết luận

Như vậy, trong bài báo này, chúng tôi đã nghiên cứu tính chất quang học của hệ exciton trong trạng thái ngưng tụ thông qua khảo sát độ dẫn quang trong mô hình Falicov-Kimball mở rộng có tương tác điện tử - phonon. Sử dụng gần đúng Hartree-Fock, hệ phương trình tự hợp xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton đã được rút ra. Trên cơ sở lý thuyết Kubo về phản hồi quang học tuyến tính, chúng tôi thu được biểu thức giải tích của độ dẫn quang. Thực hiện chương trình tính số để khảo sát sự phụ thuộc của độ dẫn quang vào nhiệt độ và áp suất ngoài, kết quả cho thấy, trong trạng thái ngưng tụ exciton, độ dẫn quang cho thấy đỉnh sắc nét xuất hiện ở tần số gấp hai lần tham số trật tự ngưng tụ exciton. Tăng nhiệt độ hay giảm áp suất ngoài, đỉnh của phổ độ dẫn quang di chuyển sang trái và trọng lượng phổ giảm. Đỉnh phổ trở nên ít có ý nghĩa hơn nếu hệ không ở trong trạng thái ngưng tụ.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Bộ Giáo dục và Đào tạo trong đề tài mã số B2021-MDA-14.

Tài liệu tham khảo

- Bogoliubov, N. N., Tolmachev, V. V., Shirkov, D. V., 1959. *New Method in the Theory of Superconductivity*. Consultants Bureau, New York.
- Bruus, H. and Flensberg, K., 2004. *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*. Oxford University Press, New York.
- Bronold, F. X. and Fehske, H., 2006. *Possibility of an excitonic insulator at the semiconductor-semimetal transition*. Phys. Rev. B 74: 165107.
- Brydon, P. M. R., 2008. *Slave-boson theory of the extended Falicov-Kimball model*. Phys. Rev. B 77: 045109.
- Thi-Hong-Hai-Do, Dinh-Hoi-Bui and Van-Nham-Phan, 2017. *Phonon effects in the excitonic condensation induced in the extended Falicov-Kimball model*. Europhysics Letters 119; 47003.
- Thi-Hong-Hai Do, Huu-Nha Nguyen and Van-Nham Phan, 2019. *Thermal Fluctuations in the Phase Structure of the Excitonic Insulator Charge Density Wave State in the Extended Falicov-Kimball Model*. Journal of Electronic Materials 48: 2677.

- Thi-Hong-Hai Do and Van-Nham Phan, 2022. *Excitonic condensation state in the assistance of the adiabatic and anti-adiabatic phonons*. J. Phys.: Condens. Matter 34; 165602.
- Đỗ Thị Hồng Hải và Phan Văn Nhâm, 2018. *Giản đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình Falicov-Kimball mở rộng có tương tác điện tử – phonon*. Tạp chí Khoa học và Công nghệ Đại học Duy Tân 6 (31), 95–100.
- Kaneko, T., Toriyama, T., Konishi, T., Ohta, Y., 2013. *Orthorhombic-to-monoclinic phase transition of Ta_2NiSe_5 induced by the Bose-Einstein condensation of excitons*. Phys. Rev. B, 87:035121.
- Monney, C. et. al., 2010. *Temperaturedependent photoemission on 1T-TiSe₂: Interpretation within the exciton condensate phase model*. Phys. Rev. B, 81:155104.
- Mott, N. F., 1961. *The transition to the metallic state*. Philos. Mag., 6:287
- Moskalenko, S. A., Snoke, D. W., 2000. *Bose-Einstein Condensation of Excitons and Biexcitons*. Cambridge Univ. Press, Cambridge.
- Ninh, Q.-H., Phan, V.-N, 2021. *Mass Imbalance Effects in the Excitonic Condensation of the Extended Falicov–Kimball Model*, Phys. Status Solidi B, 258: 2000564.
- Phan, N. V., Fehske, H. and Becker, K. W., 2011. *Excitonic resonances in the 2D extended Falicov-Kimball model*. Europhys. Lett, 95: 17006.
- Sugimoto, K. et al., 2018. *Strong Coupling Nature of the Excitonic Insulator State in Ta_2NiSe_5* . Phys. Rev. Lett. 120: 247602.
- Lee, Jinwon et al., 2019. *Strong interband interaction in the excitonic insulator phase of Ta_2NiSe_5* . Physical Review B 99: 075408.
- Volkov, P. A. et. al., 2021. *Critical charge fluctuations and emergent coherence in a strongly correlated excitonic insulator*. npj Quant. Mater, 6: 52.
- 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.
- Wachter, P., Bucher, B., Malar, J., 2004. *Possibility of a superfluid phase in a Bose condensed excitonic state*. Phys. Rev. B, 69: 094502.
- Zenker, B et. al., 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.
- Zhang, Y-S. et. al., 2021. *Thermal transport signatures of the excitonic transition and associated phonon softening in the layered chalcogenide Ta_2NiSe_5* . Phys. Rev. B, 104: L121201.

ABSTRACT

Optical properties of the exciton system in the condensed state

Do Thi Hong Hai*, Nguyen Xuan Chung, Ho Quynh Anh
Hanoi University of Mining and Geology

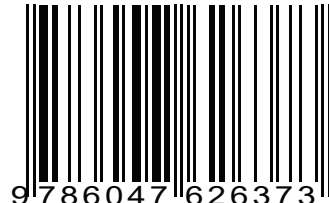
In this paper, the optical properties of the exciton system in the condensed state have been investigated through the signature of the optical conductivity in the extended Falicov-Kimball model including the electron-phonon interaction. Using the Hartree-Fock approximation, we have derived a set of self-consistent equations determining the order parameter of the excitonic condensate state. In the linear response theory, the optical conductivity has been inspected by using the Kubo formula. The numerical results of the optical conductivity have confirmed the influence of the external pressure and the temperature on the excitonic condensation. Our results are valuable in understanding the formation and stability of the excitonic condensate state in the system.

Keywords: optical conductivity, excitonic condensate, extended Falicov-Kimball model, electron-phonon interaction.

KHOA HỌC TRÁI ĐẤT VÀ TÀI NGUYÊN VỚI PHÁT TRIỂN BỀN VỮNG



ISBN: 978-604-76-2637-3



9786047 626373