

THE IMPACT OF THE MASS IMBALANCE ON OPTICAL PROPERTIES OF EXCITON SYSTEMS IN THE CONDENSATION STATE

Nguyen Thi Hau^{1,2}, Ho Quynh Anh², Do Thi Hong Hai^{2*}

¹Graduate University of Science and Technology - Vietnam Academy of Science and Technology

²Hanoi University of Mining and Geology

ARTICLE INFO	ABSTRACT
Received: 05/3/2024	In this research, the optical properties of the exciton systems in the condensed state are considered through the real part spectrum of the optical conductivity in the extended Falicov-Kimball model in the presence of phonons. Applying the Hartree-Fock approximation and the Kubo linear response theory, a set of equations determining the excitonic condensation order parameter and the real part of the optical conductivity are found. Numerical results investigating the real part of the optical conductivity affected by the mass imbalance show that in the phonon assistance, a single-peak appears in the optical conductivity spectrum in the excitonic condensation state when the mass imbalance is sufficiently small. The peak occurs at a frequency twice the exciton condensation order parameter. Decreasing the mass imbalance, the peak position moves to the right indicating the stabilization of the excitonic condensation state. When the electron-phonon coupling is large enough, the BCS-type condensation prevails even if the mass imbalance is large.
Revised: 29/5/2024	
Published: 29/5/2024	
KEYWORDS	
The excitonic condensate	
The extended Falicov-Kimball model	
Hartree-Fock approximation	
The electron-phonon coupling	
The mass imbalance	

TÍNH CHẤT QUANG CỦA HỆ EXCITON TRONG TRẠNG THÁI NGỪNG TỤ ẢNH HƯỞNG BỞI MẤT CÂN BẰNG KHỐI LƯỢNG

Nguyễn Thị Hậu^{1,2}, Hồ Quỳnh Anh², Đỗ Thị Hồng Hải^{2*}

¹Học viện Khoa học và công nghệ - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam

²Trường Đại học Mỏ - Địa chất

THÔNG TIN BÀI BÁO	TÓM TẮT
Ngày nhận bài: 05/3/2024	Trong nghiên cứu này, tính chất quang học của hệ exciton trong trạng thái ngưng tụ được xem xét thông qua quang phổ phần thực của độ dẫn quang trong mô hình Falicov-Kimball mở rộng có sự hiện diện của phonon. Áp dụng gần đúng Hartree-Fock và lý thuyết phản hồi tuyến tính Kubo, hệ phương trình xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton và biểu thức phần thực độ dẫn quang đã được tìm ra. Kết quả tính số khảo sát phần thực của độ dẫn quang ảnh hưởng bởi mất cân bằng khối lượng cho thấy, với sự hỗ trợ của phonon, hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ exciton đặc trưng bởi quang phổ độ dẫn quang đạt cực đại ở tần số gấp hai lần tham số trật tự ngưng tụ exciton khi mất cân bằng khối lượng đủ nhỏ. Giảm mất cân bằng khối lượng, đỉnh của phổ độ dẫn quang di chuyển sang phải thể hiện sự ổn định của trạng thái ngưng tụ exciton. Khi hằng số tương tác điện tử - phonon đủ lớn, trạng thái ngưng tụ dạng BCS (John Bardeen, Leon Cooper và Robert Schrieffer) chiếm ưu thế ngay cả khi mất cân bằng khối lượng lớn.
Ngày hoàn thiện: 29/5/2024	
Ngày đăng: 29/5/2024	
TỪ KHÓA	
Ngưng tụ exciton	
Mô hình Falicov-Kimball mở rộng	
Gần đúng Hartree-Fock	
Liên kết điện tử - phonon	
Mất cân bằng khối lượng	

DOI: <https://doi.org/10.34238/tnu-jst.9835>

* Corresponding author. Email: dothihonghai@hmg.edu.vn

1. Giới thiệu

Ngưng tụ exciton là một trạng thái lượng tử được hình thành khi trong vật liệu tồn tại các exciton mật độ cao ở nhiệt độ đủ thấp [1]. Mặc dù được đề xuất về mặt lý thuyết từ hơn nửa thế kỉ trước nhưng cho đến nay những nghiên cứu về trạng thái này vẫn được các nhà khoa học rất quan tâm cả phương diện lý thuyết lẫn thực nghiệm. Những quan sát thực nghiệm khẳng định sự tồn tại của trạng thái ngưng tụ exciton trong một số vật liệu là minh chứng quý giá cho những dự đoán lý thuyết về trạng thái này. Các hệ vật liệu tiêu biểu có thể kể đến như giếng lượng tử kép bán dẫn (double quantum wells - DQW) [2], [3], các vật liệu kim loại chuyển tiếp dichalcogenide (transition metal dichalcogenides – TMD) [4], [5], graphene hai lớp kép (double-bilayer graphene - DBG) [6], [7]. Trong các hệ vật liệu này, exciton được tạo thành do sự kết cặp của điện tử và lỗ trống dưới tác dụng của lực Coulomb. Và tùy theo cường độ tương tác Coulomb, trạng thái ngưng tụ exciton có thể ở dạng BEC (Bose-Einstein condensation) như của những hạt boson thông thường hoặc ở dạng BCS - tương tự như trạng thái ngưng tụ của các cặp Cooper trong lý thuyết siêu dẫn. Bên cạnh đó, trong các hệ vật liệu kể trên, mối tương quan về khối lượng của điện tử và lỗ trống là không giống nhau. Do vậy, về mặt lý thuyết, mô hình Falicov-Kimball mở rộng (extended Falicov-Kimball model – EFKM) khá phù hợp với các hệ vật liệu trên vì nó mô tả tương tác giữa điện tử linh động c và điện tử định xứ f bởi tương tác Coulomb có tính tới nhảy nút của điện tử trên mức f và đã có khá nhiều các nghiên cứu về các vật liệu trên sử dụng mô hình EFKM [8], [9]. Với mô hình này, bằng cách thay đổi tích phân nhảy nút của điện tử f , ta có thể thay đổi tương quan về khối lượng giữa điện tử và lỗ trống. Khảo sát ảnh hưởng của mật cân bằng khối lượng lên sự hình thành và tính chất trạng thái ngưng tụ exciton trong các hệ vật liệu thông qua mô hình EFKM vì vậy là cần thiết.

Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng mô hình EFKM có sự hiện diện của phonon để khảo sát tính chất quang học của hệ exciton trong trạng thái ngưng tụ ảnh hưởng bởi mật cân bằng khối lượng. Trong bài báo [10], các tác giả đã thảo luận ảnh hưởng của mật cân bằng khối lượng lên tính chất quang học của hệ trong trạng thái ngưng tụ exciton thông qua mô hình EFKM thuần túy tức là chưa tính đến tương tác điện tử - phonon. Trong khi đó, các quan sát thực nghiệm đã chỉ ra vai trò quan trọng của phonon trong việc hỗ trợ hình thành và ổn định trạng thái ngưng tụ exciton [11], [12]. Chính vì vậy, mô hình EFKM có sự hiện diện của phonon là phù hợp hơn với các hệ vật liệu có xảy ra ngưng tụ exciton.

Trong phần tiếp theo của bài báo, chúng tôi áp dụng gần đúng Hartree-Fock để tìm ra hệ phương trình xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton và sử dụng lý thuyết Kubo về phản hồi tuyến tính để thiết lập biểu thức giải tích phân thực độ dẫn quang. Từ các kết quả giải tích đó, chương trình tính số giải tự hợp hệ phương trình xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton được viết dựa trên ngôn ngữ lập trình Fortran và nhờ đó nhận được giá trị của phản thực độ dẫn quang. Các kết quả tính số khảo sát phản thực độ dẫn quang khi có sự thay đổi về tương quan khối lượng giữa các điện tử c và f trong trạng thái cơ bản được chúng tôi trình bày trong phần 3. Cuối cùng là những kết luận của bài báo.

2. Mô hình và tính toán giải tích

Mô hình Falicov-Kimball mở rộng có sự hiện diện của phonon được mô tả bởi Hamiltonian dưới dạng sau:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^c \tilde{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^f \tilde{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{f}_{\mathbf{k}} + \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} \tilde{b}_{\mathbf{q}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{q}} \\ & + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}+\mathbf{q}} \tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}} \tilde{f}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \tilde{f}_{\mathbf{k}} + \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \left(\tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \tilde{f}_{\mathbf{k}} (\tilde{b}_{-\mathbf{q}}^\dagger + \tilde{b}_{\mathbf{q}}) + \tilde{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (\tilde{b}_{\mathbf{q}}^\dagger + \tilde{b}_{-\mathbf{q}}) \right) \end{aligned} \quad (1)$$

trong đó, hai số hạng đầu biểu diễn phần không tương tác của hệ điện tử – phonon với $\tilde{c}_{\mathbf{k}}^\dagger$ ($\tilde{c}_{\mathbf{k}}$) và $\tilde{f}_{\mathbf{k}}^\dagger$ ($\tilde{f}_{\mathbf{k}}$) tương ứng biểu diễn toán tử sinh (hủy) của điện tử c trên dải dẫn và điện tử f trên dải

hóa trị không spin mang xung lượng \mathbf{k} , $\varepsilon_{\mathbf{k}}^c(\varepsilon_{\mathbf{k}}^f)$ là năng lượng tán sắc của điện tử c (f). Số hạng thứ ba biểu diễn hệ phonon không tương tác với $\tilde{b}_{\mathbf{q}}^\dagger(\tilde{b}_{\mathbf{q}})$ tương ứng là toán tử sinh (hủy) phonon tại xung lượng \mathbf{q} và ω_0 là năng lượng không tán sắc của phonon theo mô hình Einstein. Số hạng thứ tư trong phương trình (1) biểu diễn tương tác Coulomb giữa điện tử c và điện tử f với cường độ thế tương tác U . Số hạng cuối cùng biểu diễn tương tác giữa điện tử và phonon với hằng số liên kết điện tử - phonon g .

Trong gần đúng liên kết chặt, các năng lượng tán sắc của điện tử c và điện tử f trong mạng tinh thể hình vuông với hằng số mạng bằng 1 có dạng:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{c(f)} = \varepsilon^{c(f)} - t^{c(f)}\gamma_{\mathbf{k}} - \mu \quad (2)$$

với $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{c(f)}$ và $t^{c(f)}$ lần lượt là năng lượng tại nút và tích phân nhảy nút của điện tử c (f); $\gamma_{\mathbf{k}}$ và μ lần lượt là bước nhảy trong mạng tinh thể và thế hóa học. Sự khác nhau của hai giá trị năng lượng tại nút thể hiện mức độ xen phủ của hai dải năng lượng, còn sự khác nhau của tích phân nhảy nút thể hiện mối tương quan về khối lượng của các điện tử trong hệ, nếu $|t^f| < t^c$ thể hiện điện tử f nặng hơn điện tử c và ngược lại.

Áp dụng gần đúng Hartree-Fock để viết lại toán tử tương tác Coulomb trong phương trình (1) chúng tôi thu được Hamiltonian Hartree-Fock như sau:

$$\mathcal{H}_{HF} = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^c \tilde{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^f \tilde{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{f}_{\mathbf{k}} + \Delta \sum_{\mathbf{k}} (\tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \tilde{f}_{\mathbf{k}} + \tilde{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) + \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} \tilde{b}_{\mathbf{q}}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{q}} + \sqrt{N}h(\tilde{b}_{-\mathbf{q}}^\dagger + \tilde{b}_{-\mathbf{q}}) \quad (3)$$

trong đó $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^c$ và $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^f$ là các năng lượng tán sắc tái chuẩn hóa khi có đóng góp của độ dịch Hartree-Fock được xác định bởi

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{c(f)} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{c(f)} + Un^{f(c)} \quad (4)$$

với $n^{f(c)} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}}^{f(c)} \rangle$ là mật độ của điện tử f (c). Các đại lượng Δ và h trong phương trình (3) được xem là tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton vì có chứa số hạng $\langle \tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \tilde{f}_{\mathbf{k}} \rangle$ thể hiện trạng thái lai hóa giữa điện tử c và điện tử f như sau:

$$\Delta = \frac{g}{\sqrt{N}} \langle \tilde{b}_{-\mathbf{q}}^\dagger + \tilde{b}_{\mathbf{q}} \rangle - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \tilde{f}_{\mathbf{k}} \rangle \quad (5)$$

$$h = \frac{g}{N} \left(\sum_{\mathbf{k}} \langle \tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \tilde{f}_{\mathbf{k}} \rangle + \sum_{\mathbf{k}} \langle \tilde{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \right) \quad (6)$$

Hamiltonian trong phương trình (3) gồm 2 thành phần, thành phần điện tử gồm 3 số hạng đầu còn thành phần phonon là 2 số hạng cuối. Thành phần điện tử được chéo hóa bằng cách dùng phép biến đổi Bogoliubov định nghĩa các toán tử giả hạt fermion mới như sau:

$$\begin{cases} a_{\mathbf{k}}^\dagger = \xi_{\mathbf{k}} \tilde{c}_{\mathbf{k}}^\dagger + \eta_{\mathbf{k}} \tilde{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \\ b_{\mathbf{k}}^\dagger = -\eta_{\mathbf{k}} \tilde{c}_{\mathbf{k}}^\dagger + \xi_{\mathbf{k}} \tilde{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \end{cases} \quad (7)$$

với các hệ số $\xi_{\mathbf{k}}$ và $\eta_{\mathbf{k}}$ được chọn sao cho thỏa mãn $\xi_{\mathbf{k}}^2 + \eta_{\mathbf{k}}^2 = 1$. Thành phần phonon được chéo hóa bằng định nghĩa toán tử phonon mới như sau:

$$B_{\mathbf{q}}^\dagger = \tilde{b}_{\mathbf{q}}^\dagger + \sqrt{N} \frac{h}{\omega_0} \quad (8)$$

Thay (7) và (8) vào (3) ta thu được Hamiltonian hoàn toàn chéo hóa tức là chỉ được viết dưới dạng toàn phương của các toán tử sinh, hủy:

$$\mathcal{H}_{dia} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^1 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^2 b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} B_{\mathbf{q}}^\dagger B_{\mathbf{q}} \quad (9)$$

trong đó $E_{\mathbf{k}}^{1(2)}$ là các năng lượng giả hạt tái chuẩn hóa, được xác định bởi:

$$E_{\mathbf{k}}^{1(2)} = \frac{1}{2} \left[\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^f + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c \mp \text{sgn}(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^f - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c) \Gamma_{\mathbf{k}} \right] \quad (10)$$

$$\text{với } \Gamma_{\mathbf{k}} = \left[(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^f)^2 + 4|\Delta|^2 \right]^{1/2} \quad (11)$$

Như vậy, bằng việc chéo hóa Hamiltonian trong phương trình (3), chúng ta có thể xác định được đại lượng thể hiện trạng thái lai hóa của điện tử c (f):

$$n_{\mathbf{k}} = \langle \tilde{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \tilde{f}_{\mathbf{k}} \rangle = -[n^F(E_{\mathbf{k}}^1) - n^F(E_{\mathbf{k}}^2)] \operatorname{sgn}(\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^f - \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c) \frac{\Delta}{\Gamma_{\mathbf{k}}} \quad (12)$$

mà cũng được xem là tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton với $n_F(E_{\mathbf{k}}^{1(2)})$ là các hàm phân bố Fermi-Dirac có dạng $n_F(\varepsilon) = \frac{1}{1+e^{\varepsilon/T}}$. Từ đây ta có được hệ các phương trình (4), (10) – (12) xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton.

Để thảo luận về tính chất quang học của hệ trong trạng thái ngưng tụ exciton, tiếp theo chúng ta đi tìm biểu thức giải tích của độ dẫn quang. Phần thực của độ dẫn quang được xác định theo công thức Kubo [13] như sau

$$\sigma(\omega) = \operatorname{Re} \frac{i}{\omega N^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle\langle \mathbf{j}_{\mathbf{k}}^\dagger, \mathbf{j}_{\mathbf{k}'} \rangle\rangle_{(\omega)} \quad (13)$$

với $\mathbf{j}_{\mathbf{k}}$ là toán tử dòng toàn phần được định nghĩa:

$$\mathbf{j}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}^c}{\partial \mathbf{k}} \tilde{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}} + \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}^f}{\partial \mathbf{k}} \tilde{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{f}_{\mathbf{k}} \right\} \quad (14)$$

Thay (2) và (7) vào (14) và viết phương trình chuyển động cho hàm Green hai hạt, chúng ta thu được biểu thức phần thực độ dẫn quang như sau:

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) = & \frac{\pi}{\omega N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}^f}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}^c}{\partial \mathbf{k}} \right)^2 \xi_{\mathbf{k}}^2 \eta_{\mathbf{k}}^2 [n_F(E_{\mathbf{k}}^1) - n_F(E_{\mathbf{k}}^2)] \\ & \times \{ \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^2 + E_{\mathbf{k}}^1) - \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^1 + E_{\mathbf{k}}^2) \} \end{aligned} \quad (15)$$

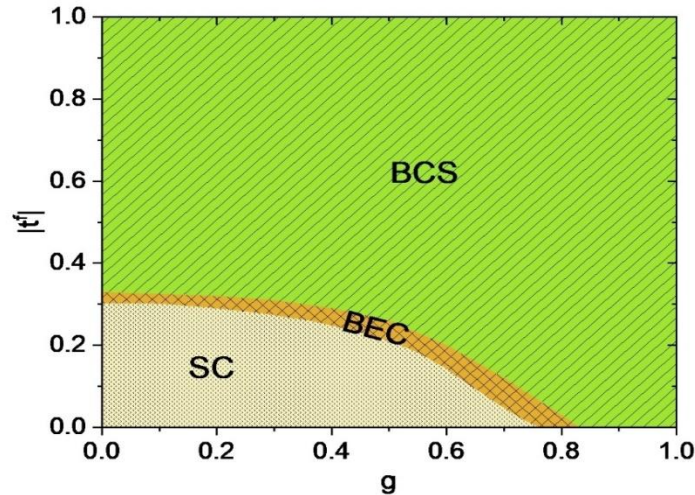
Với nghiệm nhận được từ việc giải tự hợp hệ phương trình ở trên, chúng ta có thể dễ dàng nhận được giá trị phần thực của độ dẫn quang từ trong công thức (15).

3. Kết quả tính số và thảo luận

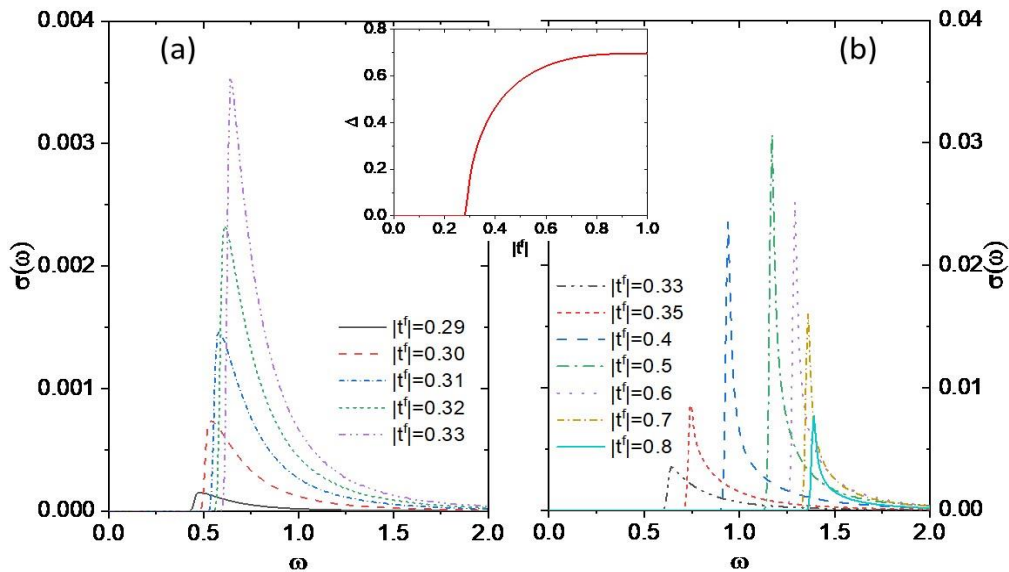
Từ các kết quả tính toán giải tích ở phần trước, chúng tôi thiết lập chương trình tính số giải tự hợp các phương trình (4), (10)-(12) để tìm tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton và từ đó nhận được giá trị cụ thể của phần thực độ dẫn quang từ phương trình (15). Từ các kết quả số đó, các giản đồ pha trạng thái cơ bản thể hiện ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng và cường độ liên kết điện tử-phonon lên tính chất quang học của hệ trong trạng thái ngưng tụ exciton được thiết lập. Ở đây, các tính toán số được thực hiện trong hệ hai chiều gồm $N = 200 \times 200$ nút mạng và chọn $t^c = 1$ là đơn vị của năng lượng. Khi đó tất cả các đại lượng đều được xác định với đơn vị t^c . Không mất tính tổng quát, chúng tôi cố định năng lượng không tán sắc của phonon $\omega_0 = 2,0$ và hiệu hai mức năng lượng $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 2,0$. Trong các nghiên cứu trước đó, chúng tôi đã khẳng định exciton trong hệ ngưng tụ khi cường độ thế tương tác Coulomb có giá trị trong một khoảng giới hạn, do đó thế tương tác Coulomb ở đây được chọn với giá trị trung bình $U = 3,5$. Để biểu thị điện tử f định xứ hơn điện tử c , giá trị của tích phân nhảy nút của điện tử f được lựa chọn sao cho $|t^f| < 1$ và sự mất cân bằng khối lượng của các điện tử c và điện tử f trong hệ được thể hiện bởi giá trị của $|t^f|$.

Trước tiên, chúng tôi thiết lập giản đồ pha trạng thái cơ bản mô tả chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton trong mặt phẳng $(g, |t^f|)$. Giản đồ pha nhận được từ việc xác định giá trị tới hạn của tích phân nhảy nút $|t^f|$ ứng với mỗi giá trị của hằng số liên kết điện tử-phonon g mà tại đó tham số trật tự Δ khác không. Giản đồ pha Hình 1 cho thấy với $|t^f|$ và g nhỏ, hệ ở trong pha bán dẫn (vùng SC) với các dải hóa trị và dải dẫn tách xa nhau. Tăng dần tích phân nhảy nút $|t^f|$ hay giảm mất cân bằng khối lượng, hệ chuyển từ pha bán dẫn sang trạng thái ngưng tụ exciton dạng BEC (Bose-Einstein condensation) tại một giá trị tới hạn của $|t^f|$ (vùng kê caro BEC). Trong trạng thái này, một số lượng lớn các exciton được hình thành và ngưng tụ với tham số trật tự $n_{\mathbf{k}}$ đạt cực đại tại xung lượng $\mathbf{k} = 0$. Tiếp tục tăng $|t^f|$, hệ chuyển từ trạng thái ngưng tụ exciton dạng BEC sang trạng thái ngưng tụ dạng BCS - tương tự như trạng thái ngưng tụ của các cặp Cooper trong lý thuyết BCS (John Bardeen, Leon Cooper và Robert Schrieffer) (vùng gạch

chéo BCS). Trong trường hợp này, tham số trật tự $n_{\mathbf{k}}$ có giá trị cực đại tại các xung lượng gần xung lượng Fermi và mặt Fermi đóng vai trò quan trọng trong việc kết cặp các điện tử $c - f$ gần mặt Fermi hình thành trạng thái ngưng tụ. Do đó, để thể hiện chi tiết bản chất của trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ, ranh giới giao nhau BCS-BEC của các trạng thái ngưng tụ exciton cũng được thể hiện trong giản đồ pha ở Hình 1 thông qua việc xác định vị trí mà tại đó tham số trật tự $n_{\mathbf{k}}$ đạt cực đại tại xung lượng $\mathbf{k} = 0$.



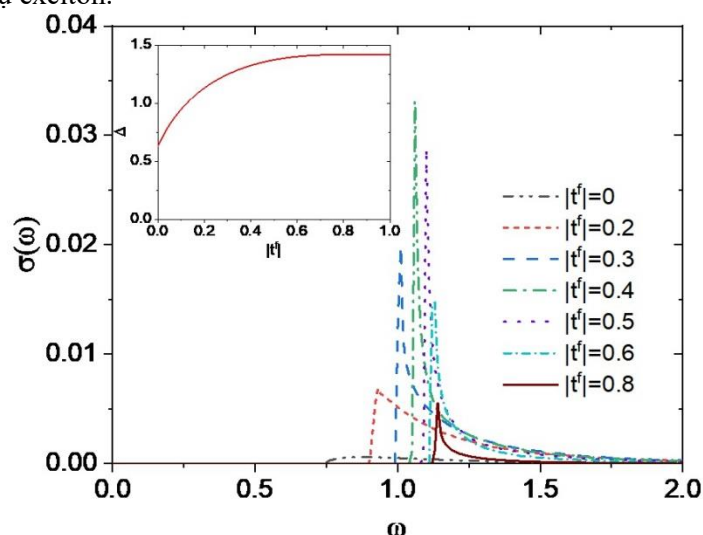
Hình 1. Giản đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton trong mặt phẳng $(g, |t^f|)$ trong trạng thái cơ bản



Hình 2. Phần thực của độ dẫn quang $\sigma(\omega)$ trong trạng thái ngưng tụ exciton ứng với một vài giá trị của $|t^f|$ khi $g = 0,2$. Hình nhỏ ở giữa biểu thị tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton Δ như một hàm của $|t^f|$

Tiếp theo, chúng tôi phân tích các đặc tính quang học của hệ ở trạng thái ngưng tụ exciton bằng cách thảo luận về phần thực của quang phổ độ dẫn quang. Phần thực của độ dẫn quang đại diện cho hấp thụ quang học và cho những thông tin chi tiết về sự hình thành các exciton trong hệ. Khi trật tự exciton không tồn tại, độ dẫn quang hoàn toàn biến mất. Chỉ khi sự lai hóa giữa các lỗ trống trong vùng hóa trị và các điện tử trong vùng dẫn xảy ra hay trật tự exciton xuất hiện thì phần thực của độ dẫn quang biểu hiện trọng lượng quang phổ hữu hạn. Trên Hình 2, phần thực của độ dẫn quang ở nhiệt độ không được hiển thị với một số giá trị của tích phân nhảy nút $|t^f|$

khi $g = 0,2$. Với giá trị cho trước của hằng số liên kết điện tử-phonon $g = 0,2$, khi $|t^f|$ đủ lớn, hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ exciton (xem Hình 1). Giảm dần trên Hình 2 cho thấy, độ dẫn quang luôn đạt cực đại tại tần số $\omega_c = 2\Delta$ thể hiện trạng thái cộng hưởng do sự lai hóa của các điện tử dải f và dải c . Khi $\omega < \omega_c$, độ dẫn quang hoàn toàn bằng không. Với $|t^f|$ nhỏ, hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ exciton dạng BEC (xem Hình 1), khi đó một đỉnh rộng không đối xứng xuất hiện trong quang phổ độ dẫn quang với cường độ nhỏ (Hình 2a). Độ cao của đỉnh tăng khi tăng giá trị của tích phân nhảy nút $|t^f|$, hay giảm sự mất cân bằng khối lượng. Khi $|t^f| \geq 0,33$ tức là khối lượng của lỗ trống có thể so sánh được với khối lượng điện tử, khi đó dải dẫn xen phủ mạnh và mặt Fermi rộng đóng vai trò quan trọng trong việc thiết lập trạng thái liên kết điện tử - lỗ trống hình thành trạng thái ngưng tụ. Điều này thể hiện hệ đã chuyển sang trạng thái ngưng tụ exciton dạng BCS được đặc trưng bởi sự xuất hiện của đỉnh sắc nét cường độ cao trong quang phổ độ dẫn quang (xem Hình 2b). Kết quả này hoàn toàn phù hợp với giản đồ pha được biểu thị trong Hình 1. Tham số trật tự ngưng tụ exciton Δ tăng khi tăng $|t^f|$ (xem hình nhỏ ở giữa Hình 2) và cũng được minh họa trong dấu hiệu của quang phổ độ dẫn quang bởi sự tăng của ω_c theo tham số trật tự. Cường độ đỉnh cũng tăng và vị trí của đỉnh dịch chuyển sang phải khi tăng $|t^f|$ hay giảm mất cân bằng khối lượng. Tuy nhiên, khi $|t^f| \geq 0,5$, cường độ đỉnh giảm khi tăng $|t^f|$ nhưng vị trí của đỉnh vẫn dịch chuyển sang phải thể hiện hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ exciton.



Hình 3. Phần thực của độ dẫn quang $\sigma(\omega)$ trong trạng thái ngưng tụ exciton ứng với một vài giá trị của $|t^f|$ khi $g = 0,8$. Hình nhỏ bên trái biểu thị tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton Δ như một hàm của $|t^f|$

Tăng hằng số liên kết điện tử - phonon lên $g = 0,8$, Hình 3 cho thấy quang phổ của phần thực độ dẫn quang trong trạng thái ngưng tụ exciton khi thay đổi mối tương quan về khối lượng của các điện tử dải dẫn và dải hóa trị. Giảm dần cho thấy ngay cả khi $|t^f| = 0$ hay khối lượng điện tử f là không đáng kể so với khối lượng của điện tử c , hệ vẫn ở trong trạng thái ngưng tụ exciton dạng BEC được biểu thị bởi giá trị khác không của tham số trật tự Δ (xem hình nhỏ bên trái) và đỉnh phổ mở rộng với cường độ không đáng kể trong quang phổ độ dẫn quang. Tăng $|t^f|$ hay giảm mất cân bằng khối lượng, cường độ đỉnh tăng mạnh và đỉnh phổ càng sắc nét hơn thể hiện hệ chuyển sang trạng thái ngưng tụ exciton dạng BCS. Trong trường hợp này, dạng ngưng tụ BCS chiếm ưu thế và vị trí của đỉnh vẫn dịch chuyển sang phải khi tăng $|t^f|$ chứng tỏ trạng thái ngưng tụ exciton được ổn định khi giảm mất cân bằng khối lượng giữa các điện tử $c - f$. Kết quả này cũng hoàn toàn phù hợp với giản đồ pha được biểu thị trên Hình 1.

4. Kết luận

Trong bài báo này, tính chất quang của hệ exciton trong trạng thái ngưng tụ ảnh hưởng bởi mất cân bằng khối lượng đã được thảo luận thông qua khảo sát quang phổ phân thực của độ dẫn quang. Áp dụng gần đúng Hartree-Fock cho mô hình Falicov-Kimball mở rộng có sự hiện diện của phonon, hệ phương trình tự hợp xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton được tìm thấy, từ đó chúng tôi thiết lập biểu thức giải tích của độ dẫn quang thông qua lý thuyết Kubo về phản hồi tuyến tính. Sử dụng ngôn ngữ lập trình Fortran để viết chương trình tính số giải tự hợp xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ và nhờ đó chúng tôi tìm được giá trị cụ thể của phần thực độ dẫn quang. Từ dữ liệu tính số, giản đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton và quang phổ độ dẫn quang ảnh hưởng bởi mất cân bằng khối lượng trong trạng thái cơ bản được thiết lập. Kết quả cho thấy, với sự hỗ trợ của phonon, hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ exciton đặc trưng bởi quang phổ độ dẫn quang đạt cực đại ở tần số gấp hai lần tham số trật tự ngưng tụ exciton khi mất cân bằng khối lượng đủ nhỏ. Khi liên kết điện tử - phonon nhỏ, hệ chuyển từ trạng thái ngưng tụ exciton dạng BEC với đỉnh không đối xứng cường độ thấp trong quang phổ độ dẫn quang sang trạng thái ngưng tụ exciton dạng BCS với đỉnh sắc nét cường độ cao khi giảm mất cân bằng khối lượng. Còn khi liên kết điện tử - phonon đủ lớn, trạng thái ngưng tụ exciton dạng BCS chiếm ưu thế. Giảm mất cân bằng khối lượng, đỉnh của phổ độ dẫn quang di chuyển sang phải thể hiện sự ổn định của trạng thái ngưng tụ exciton. Những nghiên cứu kỹ lưỡng hơn về tính chất động học của chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton ảnh hưởng bởi mất cân bằng khối lượng thông qua khảo sát tính chất của hàm cảm ứng exciton động sẽ là những nghiên cứu tiếp theo của chúng tôi.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Mở - Địa chất, trong đề tài mã số T23-15.

TÀI LIỆU THAM KHẢO/ REFERENCES

- [1] N. F. Mott, "The transition to the metallic state," *Philosophical Magazine*, vol. 6, pp. 287-309, 1961.
- [2] Y. J. Chung, K. A. V. Rosales, K. W. Baldwin, *et al.*, "Ultra-high-quality two-dimensional electron systems," *Nat. Mater.*, vol. 20, pp. 632-637, 2021.
- [3] C. Lagoin, S. Suffit, K. Baldwin, *et al.*, "Dual-density waves with neutral and charged dipolar excitons of GaAs bilayers," *Nat. Mater.*, vol. 22, pp. 170-174, 2023.
- [4] L. Ma, P. X. Nguyen, Z. Wang, *et al.*, "Strongly correlated excitonic insulator in atomic double layers," *Nature*, vol. 598, pp. 585-589, 2021.
- [5] H. Fang, Q. Lin, Y. Zhang, *et al.*, "Localization and interaction of interlayer excitons in MoSe₂/WSe₂ heterobilayers," *Nat. Commun.*, vol. 14, p. 6910, 2023.
- [6] Z. Wang *et al.*, "Evidence of high-temperature exciton condensation in two-dimensional atomic double layers," *Nature*, vol. 574, pp. 76-80, 2019.
- [7] M. C. DeCapua, Y.-C. Wu, T. Taniguchi, K. Watanabe, and J. Yan, "Probing the bright exciton state in twisted bilayer graphene via resonant Raman scattering," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 119, 2021, Art. no. 013103.
- [8] R. Fujiuchi, T. Kaneko, Y. Ohta, and S. Yunoki, "Photoinduced electron-electron pairing in the extended Falicov-Kimball model," *Phys. Rev. B*, vol. 100, 2019, Art. no. 045121.
- [9] S. Ejima, F. Lange, and H. Fehske, "Photoinduced metallization of excitonic insulators," *Phys. Rev. B*, vol. 105, 2022, Art. no. 245126.
- [10] Q. H. Ninh and V. N. Phan, "Mass Imbalance Effects in the Excitonic Condensation of the Extended Falicov-Kimball Model," *Phys. Status Solidi B*, vol. 258, 2021, Art. no. 2000564.
- [11] C. Monney, C. Battaglia, H. Cercellier, P. Aebi, and H. Beck, "Exciton condensation driving the periodic lattice distortion of 1T-TiSe₂," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, 2021, Art. no. 106404.
- [12] K. Kim, H. Kim, J. Kim, C. Kwon, J. S. Kim, and B. J. Kim, "Direct observation of excitonic instability in Ta₂NiSe₅," *Nat. Commun.*, vol. 12, 2021, Art. no. 1969.
- [13] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*, Oxford University Press, New York, 2004.