



TRƯỜNG ĐẠI HỌC
SỨ PHẠM KỸ THUẬT HƯNG YÊN



HỌC VIỆN
CÔNG NGHỆ BƯU CHÍNH VIỄN THÔNG



TRƯỜNG ĐẠI HỌC
KINH TẾ - KỸ THUẬT CÔNG NGHIỆP

HỘI THẢO KHOA HỌC QUỐC GIA

KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ ỨNG DỤNG TRONG THỜI ĐẠI SỐ

NATURAL SCIENCES AND APPLICATIONS
IN THE DIGITAL AGE

NSA2024



NHÀ XUẤT BẢN KHOA HỌC VÀ KỸ THUẬT

MASSERA-TYPE THEOREM TO A CLASS OF NON-AUTONOMOUS LINEAR DIFFERENTIAL EQUATIONS	106
<i>Nguyen Thi Loan, Tran Thi Hai Ly</i>	
ĐỊNH LÝ PUTINAR VÀ ỨNG DỤNG GIẢI BÀI TOÁN TỐI ƯU ĐA THỨC	112
<i>Hoàng Phi Dũng</i>	
GIẢI XẤP XỈ PHƯƠNG TRÌNH ĐÀN HỒI BẰNG PHƯƠNG PHÁP PHẦN TỬ HỮU HẠN	120
<i>Tạ Thị Thanh Mai, Nguyễn Minh Nguyệt, Phạm Ngọc Anh, Bùi Xuân Diệu</i>	
CÔNG THỨC TRUY HỒI CHO XÁC SUẤT THIỆT HẠI	126
<i>Đặng Văn Tiến, Nguyễn Huy Hoàng, Nguyễn Quang Chung</i>	
TÍNH ỔN ĐỊNH HÓA CỦA HỆ ĐIỀU KHIỂN PHI TUYẾN CẤP PHÂN PHỐI SỬ DỤNG ĐIỀU KHIỂN KÍCH HOẠT SỰ KIỆN	132
<i>Trần Ngọc Tuấn, Nguyễn Quang Huy, Mai Việt Thuận</i>	
Phần 2. ỨNG DỤNG VẬT LÝ TRONG KHOA HỌC CÔNG NGHỆ	141
HOẠT TÍNH QUANG XÚC TÁC CỦA VẬT LIỆU SnO₂ PHA TẠP Bi³⁺	142
<i>Lê Thị Thu Hiền</i>	
QUANTUM PHASE TRANSITION IN BINARY BOSE GASES	150
<i>Vũ Kim Thái, Đặng Thị Minh Huệ</i>	
ỨNG DỤNG VẬT LÝ XÂY DỰNG INTERNET LƯỢNG TỬ	156
<i>Lê Thị Minh Thanh</i>	
ẢNH HƯỞNG CỦA SỰ MẤT CÂN BẰNG KHỐI LƯỢNG VÀ TƯƠNG TÁC ĐIỆN TỬ - PHONON LÊN SỰ HÌNH THÀNH TRẠNG THÁI ĐIỆN MÔI EXCITON	164
<i>Nguyễn Thị Hậu, Đỗ Thị Hồng Hải</i>	
ĐẶC TÍNH NHẠY KHÍ NH₃ Ở NHIỆT ĐỘ PHÒNG CỦA CẢM BIẾN DỰA TRÊN VẬT LIỆU TỔ HỢP ỐNG NANO CÁC BON VÀ HẠT NANO SnO₂-Ni	170
<i>Dương Vũ Trường, Đỗ Mạnh Hùng, Lương Hữu Bắc</i>	
TUNING INDEPENDENTLY THE EXCHANGE BIAS AND COERCIVITY IN TOP-PINNED AND BOTTOM-PINNED Co/Pd MULTILAYERS BY FeMn	177
<i>Giap Van Cuong, Nguyen Thi Ngoc Anh</i>	
THE RELATIONSHIP BETWEEN THE ANNEALING TEMPERATURE TO THE PHOTOLUMINESCENCE OF ZNO AND THE RESPONSE SENSITIVITY OF GAS SENSORS USING NANO MATERIALS	182
<i>Hoang Van Han, Dam Nhan Ba, Vu Thi Kim Lien</i>	
ẢNH HƯỞNG CỦA NHIỆT ĐỘ KẾT TINH LÊN CẤU TRÚC VÀ TÍNH CHẤT QUANG CỦA VẬT LIỆU BiFeO₃-BaTiO₃	189
<i>Nguyễn Thị Thu, Nguyễn Ngọc Minh, Vũ Thị Huệ, Phạm Ngọc Thắng, Phạm Quang Tú, Ngô Đức Quân</i>	
NGHIÊN CỨU, CHẾ TẠO VẬT LIỆU LAI HÓA GRAPHENE-CARBON NANOTUBE (CNT) BẰNG PHƯƠNG PHÁP CVD	196
<i>Phạm Thế Tân</i>	

ẢNH HƯỞNG CỦA SỰ MẤT CÂN BẰNG KHỐI LƯỢNG VÀ TƯƠNG TÁC ĐIỆN TỬ - PHONON LÊN SỰ HÌNH THÀNH TRẠNG THÁI ĐIỆN MÔI EXCITON

Nguyễn Thị Hậu¹, Đỗ Thị Hồng Hải^{1,*}

¹Trường Đại học Mở - Địa chất
*dothihonghai@humg.edu.vn

Tóm tắt:

Ảnh hưởng của sự mất cân bằng khối lượng và tương tác điện tử - phonon lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình Falicov–Kimball mở rộng đã được chúng tôi thảo luận cụ thể. Bằng việc áp dụng gần đúng gần đúng Hartree-Fock trong mô hình Falicov–Kimball mở rộng để tính toán các thông số trạng thái ngưng tụ exciton, chúng tôi đã vẽ được các giản đồ pha mô tả trạng thái ngưng tụ exciton. Các kết quả cho thấy khi α^f đủ lớn, hệ tồn tại ở trạng thái ngưng tụ dạng BCS khi mất cân bằng khối lượng nhỏ và xuất hiện vùng giao nhau BCS-BEC khi mất cân bằng khối lượng lớn. Vùng ngưng tụ BEC được mở rộng về phía α^f nhỏ và mất cân bằng khối lượng lớn khi có thêm tương tác điện tử - phonon.

Từ khóa: gần đúng Hartree-Fock, mất cân bằng khối lượng, mô hình Falicov-Kimball mở rộng, phonon, trạng thái ngưng tụ exciton.

1. GIỚI THIỆU

Được hình thành từ giả thiết về sự ghép cặp của điện tử ở dải dẫn và lỗ trống ở dải hóa trị, exciton hiện vẫn đang được các nhà khoa học trong nước và trên thế giới quan tâm nghiên cứu. Khi mật độ đủ lớn và nhiệt độ đủ thấp, các exciton có thể chuyển sang trạng thái ngưng tụ mới gọi là trạng thái điện môi exciton (Exciton Insulator – EI) [1] hay còn gọi là trạng thái ngưng tụ exciton. Trong các hệ bán kim loại trạng thái EI tồn tại ở dạng BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer), giống như trạng thái siêu dẫn được mô tả bằng lý thuyết BCS, trong khi đó đối với các hệ bán dẫn thì trạng thái EI lại tồn tại ở dạng BEC (Bose-Einstein condensation). Dữ liệu thực nghiệm đầu tiên cho thấy dấu hiệu về sự giao nhau BCS-BEC là kết quả quan sát các xoáy lượng tử trong hệ fermion hai thành phần cân bằng khối lượng và mật độ của nguyên tử ⁶Li với các tương tác hấp dẫn trong phạm vi ngắn [2], kết quả này hoàn toàn phù hợp với dự đoán lý thuyết trước đó [3, 4]. Gần đây, các nghiên cứu về giao nhau BCS-BEC khi khối lượng của các fermion trong hệ không cân bằng nhau đã được thực hiện [5, 6] nhưng các nghiên cứu mới thực hiện trong mô hình chỉ xét tương tác giữa các điện tử mà chưa tính tới tương tác điện tử - phonon. Trong khi đó, thực tế cho thấy ảnh hưởng của phonon cũng đóng vai trò rất quan trọng trong việc hình thành trạng thái EI của hệ [7-9]. Do đó, trong bài báo này, chúng tôi tiếp tục nghiên cứu sự giao nhau BCS-BEC của các dạng ngưng tụ exciton trong hệ khi có sự mất cân bằng khối lượng và có tính tới đóng góp của tương tác điện tử - phonon.

Về mặt lý thuyết, một trong những mô hình giải quyết tốt bài toán ngưng tụ exciton là mô hình Falicov-Kimball mở rộng (extended Falicov-Kimball – EFK) [10, 11] đây là mô hình mô tả tương tác giữa điện tử c với điện tử f thông qua tương tác Coulomb và có tính tới nhảy nút của điện tử trên mức f , sự ghép cặp của điện tử c và điện tử f tương đương với một trạng thái exciton. Các nghiên cứu về ảnh hưởng của sự mất cân bằng khối lượng lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ EI trong mô hình EFK đã được nghiên cứu, tuy nhiên ảnh hưởng của tương tác điện tử - phonon trong hệ chưa được tính đến do đó chưa phản ánh đúng bản chất bài toán thực tế.

Trong phần tiếp theo của bài báo, chúng tôi sẽ trình bày Hamiltonian trong mô hình EFK khi có tính tới tương tác điện tử - phonon và các kết quả tính toán giải tích bằng việc áp dụng gần đúng Hartree-Fock.

Từ các kết quả tính toán giải tích, chúng tôi biểu diễn các giản đồ pha mô tả chuyển pha BCS-BEC trong phần 3 của bài báo.

2. MÔ HÌNH VÀ TÍNH TOÁN LÝ THUYẾT

Hamiltonian trong mô hình EFK khi có tính tới tương tác điện tử - phonon được biểu diễn dưới dạng sau:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} + \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} p_{\mathbf{q}}^{\dagger} p_{\mathbf{q}} \\ & + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} + \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \left(c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} (p_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{\mathbf{q}}) + f_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (p_{\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{-\mathbf{q}}) \right) \end{aligned} \quad (1)$$

Ba số hạng đầu trong phương trình (1) lần lượt mô tả năng lượng của hệ điện tử ở dải dẫn, điện tử ở dải hóa trị và hệ phonon khi không tương tác, trong đó, $c_{\mathbf{k}}^{\dagger} (c_{\mathbf{k}})$ và $f_{\mathbf{k}}^{\dagger} (f_{\mathbf{k}})$ là biểu diễn toán tử sinh (hủy) của các điện tử c và điện tử f không spin mang xung lượng \mathbf{k} , $p_{\mathbf{q}}^{\dagger} (p_{\mathbf{q}})$ biểu diễn toán tử sinh (hủy) của phonon tại xung lượng \mathbf{q} với ω_0 là năng lượng không tán sắc của phonon, $\alpha_{\mathbf{k}}^{c(f)}$ là năng lượng kích thích điện tử c và f được cho bởi

$$\alpha_{\mathbf{k}}^{c(f)} = \alpha^{c(f)} - 2t^{c(f)} (\cos k_x + \cos k_y) - \mu \quad (2)$$

với μ là thế hóa học; $\alpha^{c(f)}$, $t^{c(f)}$ là năng lượng trên một nút và tích phân nhảy nút của điện tử $c(f)$. Sự khác nhau về giá trị của t^f và t^c thể hiện sự mất cân bằng khối lượng của điện tử f và điện tử c , chẳng hạn như trong các vật liệu kim loại chuyển tiếp dichalcogenides hoặc các hệ bán dẫn giếng lượng tử kép có $t^f < t^c$ thể hiện điện tử f nặng hơn điện tử c .

Số hạng thứ tư trong phương trình (1) mô tả tương tác Coulomb giữa điện tử c và f với U là cường độ thế tương tác Coulomb, còn số hạng thứ năm thể hiện tương tác điện tử - phonon trong hệ với hằng số tương tác là g , N là số nút mạng tinh thể.

Áp dụng gần đúng Hartree-Fock, chúng tôi viết lại toán tử tương tác Coulomb trong phương trình (1):

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} = & \left[\langle f_{\mathbf{k}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} \rangle c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} + \langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} \rangle f_{\mathbf{k}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} \right] \\ & - \left[\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} \rangle f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} + \langle f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \rangle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} \right] \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}} \\ & + \left[\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} \rangle \langle f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \rangle \langle f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} \rangle \right] \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}} \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} (p_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{\mathbf{q}}) = & \delta (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}}) \delta (p_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{\mathbf{q}}) - \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} \rangle \langle p_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{\mathbf{q}} \rangle \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}} \\ & + \left[c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} \langle p_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{\mathbf{q}} \rangle + \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} \rangle \langle p_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{\mathbf{q}} \rangle \right] \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (p_{\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{-\mathbf{q}}) = & \delta (f_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \delta (p_{\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{-\mathbf{q}}) - \langle f_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \langle p_{\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{-\mathbf{q}} \rangle \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}} \\ & + \left[f_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \langle p_{\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{-\mathbf{q}} \rangle + \langle f_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \langle p_{\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{-\mathbf{q}} \rangle \right] \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}} \end{aligned} \quad (5)$$

Thay (3) – (5) vào phương trình (1) và bỏ qua những thăng giáng nhỏ, chúng tôi thu được Hamiltonian Hartree-Fock như sau:

$$\mathcal{H}_{HF} = \sum_{\mathbf{k}} \bar{\alpha}_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \bar{\alpha}_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} + \Delta \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} + f_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) + \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} p_{\mathbf{q}}^{\dagger} p_{\mathbf{q}} + \sqrt{N} \tau (p_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + p_{-\mathbf{q}}) \quad (6)$$

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

$$\bar{\alpha}_{\mathbf{k}}^{c(f)} = \alpha_{\mathbf{k}}^{c(f)} + U n^{f(c)} \quad (7)$$

với $n^c = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle$; $n^f = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle$ tương ứng là mật độ điện tử c và điện tử f , Δ và τ trong phương trình (6) được xác định bởi:

$$\Delta = \frac{g}{\sqrt{N}} \langle p_{-q}^\dagger + p_q \rangle - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}+q}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle \quad (8)$$

$$\tau = \frac{g}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}+Q}^\dagger f_{\mathbf{k}} + f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+Q} \rangle \quad (9)$$

hai thông số này có chứa số hạng đặc trưng cho sự lai hóa của điện tử c và điện tử f , do đó chúng được xem là tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton. Nếu tham số này khác không chứng tỏ có tồn tại trạng thái ngưng tụ exciton và ngược lại.

Để chéo hóa Hamiltonian trong phương trình (6), ta dùng toán tử Bogoliubov

$$\begin{cases} a_{\mathbf{k}}^\dagger = \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger + \eta_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^\dagger \\ b_{\mathbf{k}}^\dagger = -\eta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger + \xi_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^\dagger \end{cases} \quad (10)$$

với các hệ số $\xi_{\mathbf{k}}$ và $\eta_{\mathbf{k}}$ được chọn sao cho thỏa mãn $\xi_{\mathbf{k}}^2 + \eta_{\mathbf{k}}^2 = 1$. Bên cạnh đó, chúng tôi định nghĩa toán tử phonon mới như sau

$$B_q^\dagger = p_q^\dagger + \sqrt{N} \frac{\tau}{\omega_0} \quad (11)$$

thay (10) và (11) vào phương trình (6) chúng tôi thu được Hamiltonian chéo hóa như sau:

$$\mathcal{H}_{dia} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^1 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^2 b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \omega_0 \sum_{\mathbf{k}} B_q^\dagger B_q \quad (12)$$

trong đó $E_{\mathbf{k}}^{1/2}$ là các năng lượng giả hạt tái chuẩn hóa được cho bởi

$$E_{\mathbf{k}}^{1/2} = \frac{\bar{\alpha}_{\mathbf{k}}^f + \bar{\alpha}_{\mathbf{k}+q}^c}{2} \mp \frac{\text{sgn}(\bar{\alpha}_{\mathbf{k}}^f - \bar{\alpha}_{\mathbf{k}+q}^c)}{2} \Gamma_{\mathbf{k}} \quad (13)$$

với

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\bar{\alpha}_{\mathbf{k}}^f - \bar{\alpha}_{\mathbf{k}+q}^c)^2 + 4|\Delta|^2} \quad (14)$$

Từ dạng chéo hóa hoàn toàn của Hamiltonian trong phương trình (12) chúng tôi có thể dễ dàng tính được giá trị kì vọng của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton

$$n_{\mathbf{k}} = \langle c_{\mathbf{k}+q}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle = -\{n_F(E_{\mathbf{k}}^1) - n_F(E_{\mathbf{k}}^2)\} \text{sgn}(\bar{\alpha}_{\mathbf{k}}^f - \bar{\alpha}_{\mathbf{k}+q}^c) \frac{\Lambda}{\Gamma_{\mathbf{k}}} \quad (15)$$

trong đó $n_F(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{\frac{\varepsilon}{T}}}$ là hàm phân bố Fermi-Dirac. Tham số trật tự trạng thái $n_{\mathbf{k}}$ giúp xác định giao

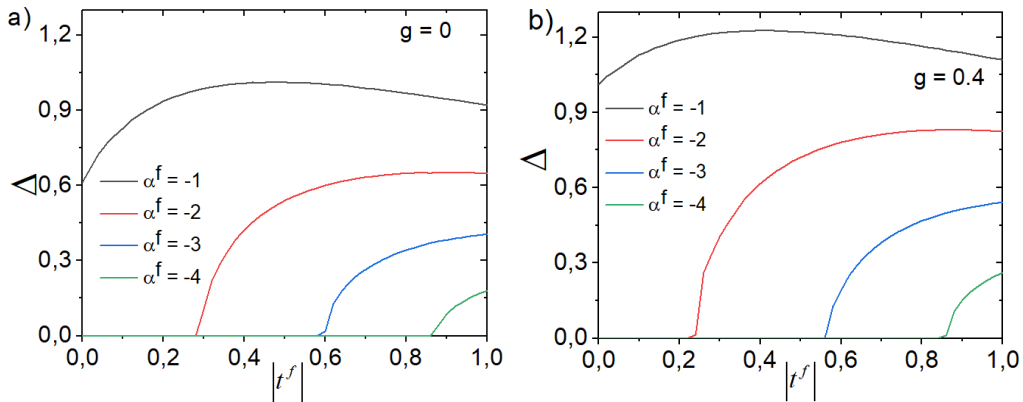
nhau BCS-BEC của các dạng ngưng tụ exciton trong hệ thông qua việc xác định các vị trí mà tại đó $n_{\mathbf{k}}$ đạt cực đại tại xung lượng $\mathbf{k} = 0$ hoặc $n_{\mathbf{k}}$ đạt cực đại tại những điểm có xung lượng gần xung lượng Fermi.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Để khảo sát ảnh hưởng của sự mất cân bằng khối lượng và tương tác điện tử - phonon lên sự tạo thành trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình EFK, chúng tôi dùng phần mềm Fortrans để vẽ các giản đồ pha biểu thị các thông số trạng thái của mô hình. Các số liệu trong bài đều được tính cho hệ 2 chiều gồm $N = 200 \times 200$ nút mạng và trong hệ đơn vị tự nhiên với $\hbar = c = k_B = 1$. Ở đây chúng tôi chọn $t^c = 1$ coi là đơn vị của năng lượng còn $|t^f|$ được chọn sao cho $0 \leq |t^f| \leq 1$, với cách chọn như vậy giá trị

của $|t^f|$ sẽ thể hiện sự mất cân bằng khối lượng giữa điện tử ở dải hóa trị và dải dẫn. Trong vùng giá trị của mình, nếu $|t^f|$ nhỏ thể hiện sự mất cân bằng khối lượng là lớn và ngược lại. Bên cạnh đó chúng tôi chọn năng lượng tại nút của điện tử c $\alpha^c = 0$, khi đó α^f của điện tử f thể hiện mức độ xen phủ của dải dẫn và dải hóa trị, nếu α^f nhỏ thể hiện dải dẫn và dải hóa trị cách xa nhau và ngược lại. Các nghiên cứu trước đây của chúng tôi cho thấy cường độ thế tương tác Coulomb có giá trị trong một khoảng giới hạn [12, 13], do đó thế tương tác Coulomb ở đây được chọn với giá trị trung bình $U = 3.5$ và tần số phonon được chọn $\omega_0 = 2.0$ thể hiện chuyển động của các điện tử chậm hơn dao động phonon.

Trước tiên, chúng tôi khảo sát tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton Δ theo $|t^f|$ ứng với các giá trị khác nhau của g và α^f , kết quả được thể hiện trên Hình 1. Hình 1a là kết quả khi chưa tính đến tương tác điện tử - phonon ($g = 0$), trong trường hợp này khi α^f nhỏ ($\alpha^f = -4$), tham số trật tự trạng thái ngưng tụ Δ chỉ khác không khi $|t^f|$ đạt giá trị đủ lớn ($0.85 \leq |t^f| \leq 1.0$), chúng tỏ trạng thái ngưng tụ exciton chỉ tồn tại khi mất cân bằng khối lượng nhỏ. Tăng α^f làm cho đỉnh của dải hóa trị tiến gần tới đáy của dải dẫn làm tăng khả năng ghép cặp của điện tử c - f , trạng thái EI vì vậy được mở rộng về phía $|t^f|$ nhỏ, tức sự mất cân bằng khối lượng lớn. Với giá trị $\alpha^f = -1$, trạng thái ngưng tụ exciton được hình thành ngay cả khi $|t^f| = 0$. Hình 1b là kết quả khi có tính tới tương tác điện tử - phonon, cụ thể ở đây chúng tôi tính toán với $g = 0.4$. Có thể thấy rõ khi có thêm tương tác điện tử - phonon làm tăng khả năng ghép cặp của điện tử c - f , do đó trạng thái ngưng tụ được mở rộng về phía $|t^f|$ nhỏ hay sự mất cân bằng khối lượng lớn.

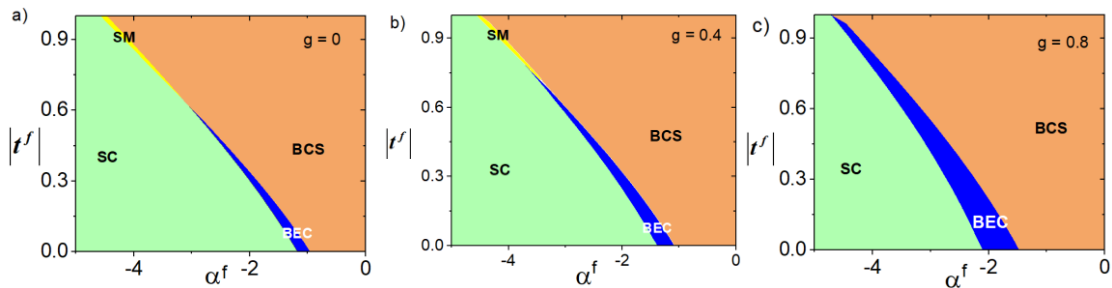


Hình 1: Khảo sát tham số trật tự trạng thái ngưng tụ Δ theo $|t^f|$ tại $g = 0$ (Hình a) và $g = 0.4$ (Hình b)

Để thấy được sự chuyển pha BCS-BEC, trên hình 2 chúng tôi biểu diễn giản đồ pha trong mặt phẳng $(\alpha^f, |t^f|)$ ứng với các giá trị khác nhau của g . Giản đồ pha trên hình 2 được xác định từ giá trị tới hạn của $|t^f|$ ứng với mỗi giá trị của năng lượng tại nút α^f mà tại đó tham số trật tự Δ khác không. Bên cạnh đó, ranh giới giao nhau BCS-BEC được xác định thông qua khảo sát n_k . Khi hệ trong pha bán kim loại, dải hóa trị và dải dẫn xen phủ nhau, mặt Fermi rộng do đó các điện tử và lỗ trống ở gần mặt Fermi dễ dàng ghép cặp để tạo thành trạng thái ngưng tụ EI, lúc này tham số trật tự n_k đạt cực đại tại xung lượng gần xung lượng Fermi, vì vậy pha EI ở dạng BCS giống như những cặp Cooper trong lý thuyết siêu dẫn. Khi hệ trong pha bán dẫn, mặc dù dải dẫn và dải hóa trị tách xa nhau nhưng với thế tương tác Coulomb đủ lớn giúp liên kết điện tử-lỗ trống để hình thành các exciton liên kết chặt, do đó hệ tồn tại trong trạng thái ngưng tụ dạng BEC và tham số trật tự n_k lúc này đạt giá trị cực đại tại xung lượng $\mathbf{k} = 0$. Từ đó chúng tôi xác định được ranh giới giao nhau BCS-BEC tại những vị trí này.

Trên hình 2a, khi chưa tính đến tương tác điện tử - phonon ($g = 0$), trong vùng mất cân bằng khối lượng nhỏ ($|t^f|$ lớn), khi α^f nhỏ dải dẫn và dải hóa trị cách xa nhau, hệ ở trong pha bán dẫn (semiconductor – SC, vùng màu xanh lá), tăng α^f làm cho đỉnh của dải hóa trị tiến dần tới đáy của dải

dẫn, hệ chuyển dần sang pha bán kim loại (semimetal – SM, vùng màu vàng), tiếp tục tăng α^f xuất hiện sự lai hóa giữa điện tử ở dải hóa trị và dải dẫn, do đó xuất hiện trạng thái ngưng tụ dạng BCS (vùng màu cam). Trong vùng mất cân bằng khối lượng lớn ($|t^f|$ nhỏ) chúng ta thấy xuất hiện vùng giao nhau BCS-BEC khi α^f đủ lớn, kết quả này hoàn toàn phù hợp với các nghiên cứu trước đó về giao nhau BCS-BEC trong mô hình EFK [14-16]. Trong vùng này, khi α^f nhỏ hệ tồn tại ở pha SC, tăng α^f đến giá trị đủ lớn xuất hiện trạng thái ngưng tụ dạng BEC, nếu tiếp tục tăng α^f làm cho hai dải năng lượng xen phủ lẫn nhau, khi này hệ sẽ tồn tại trong trạng thái ngưng tụ dạng BCS. Có thể thấy khi α^f lớn trạng thái ngưng tụ có thể hình thành ngay cả khi $|t^f|=0$, kết quả này hoàn toàn phù hợp với kết quả khảo sát trên Hình 1. Tương tác điện tử - phonon làm tăng khả năng ghép cặp $c-f$, do đó khi tính thêm tương tác điện tử - phonon trên Hình 2b và Hình 2c chúng ta thấy vùng ngưng tụ BEC được mở rộng về phía mất cân bằng khối lượng lớn.



Hình 2: Giản đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton trong mặt phẳng $(\alpha^f, |t^f|)$ ứng với các giá trị $g = 0$ (a), $g = 0,4$ (b) và $g = 0,8$ (c). Vùng bán dẫn SC và bán kim loại SM tương ứng với vùng màu xanh lá và màu vàng. Vùng ngưng tụ BEC và BCS tương ứng với vùng màu xanh đậm và màu cam

Như vậy, giản đồ pha trên Hình 2 đã cho chúng ta một bức tranh toàn diện về ảnh hưởng của sự mất cân bằng khối lượng và vai trò của tương tác điện tử - phonon lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình EFK. Trong các nghiên cứu tiếp theo chúng tôi sẽ tiếp tục khảo sát ảnh hưởng của thế tương tác Coulomb lên sự hình thành trạng thái EI ứng với các trường hợp mất cân bằng khối lượng khác nhau.

4. KẾT LUẬN

Trong bài báo này chúng tôi đã khảo sát ảnh hưởng của sự mất cân bằng khối lượng và tương tác điện tử - phonon lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình EFK. Bằng việc áp dụng gần đúng Hartree-Fock trong mô hình EFK chúng tôi đã tính toán các tham số trạng thái ngưng tụ trong mô hình. Từ đó vẽ các giản đồ pha thông qua phần mềm Fortran để khảo sát sự hình thành trạng thái ngưng tụ EI theo năng lượng tại nút α^f khi thay đổi sự mất cân bằng khối lượng và tương tác điện tử - phonon ở trạng thái cơ bản. Các kết quả chỉ ra rằng, khi sự mất cân bằng khối lượng nhỏ trạng thái ngưng tụ exciton được hình thành khi α^f đủ lớn, trạng thái ngưng tụ exciton trong trường hợp này tồn tại ở dạng BCS. Khi mất cân bằng khối lượng lớn, xuất hiện vùng giao nhau BCS-BEC khi α^f đủ lớn. Khi có thêm hằng số tương tác điện tử - phonon, vùng ngưng tụ BEC được mở rộng về phía α^f nhỏ và sự mất cân bằng khối lượng lớn.

Tài liệu tham khảo

- [1] N. F. Mott, (1961), “The transition to the metallic state”, *Philosophical Magazine*, **vol. 6**, pp. 287-309.
- [2]. M. W. Zwierlein et al. (2005), “Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas”, *Nature (London)* **vol. 435**, pp. 1047-1051.
- [3]. P. Nozières and S. Schmitt-Rink (1985), “Bose condensation in an attractive fermion gas: From weak to strong coupling superconductivity”, *Journal of Low Temperature Physics*, **vol. 59**, pp. 195-211.

- [4]. C. A. R. Sá de Melo, Mohit Randeria, and Jan R. Engelbrecht (1993), “Crossover from BCS to Bose superconductivity: Transition temperature and time-dependent Ginzburg-Landau theory”, *Physical Review Letters*, **vol. 71**, pp. 3202.
- [5]. Samira Saberi-Pouya et al. (2020), “Experimental conditions for the observation of electron-hole superfluidity in GaAs heterostructures”, *Physical Review B*, **vol. 101**, pp. 140501(R).
- [6]. Sara Conti, Andrea Perali, François M. Peeters, David Neilson (2021), “Effect of Mismatched Electron-Hole Effective Masses on Superfluidity in Double Layer Solid-State Systems”, *Condensed Matter*, **vol. 6**, pp. 14.
- [7]. P. Wachter (2018), “Exciton condensation and superfluidity in $\text{TmSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$ ”, *Advances in Materials Physics and Chemistry*, **vol. 8**, pp. 120-142.
- [8]. Kwangrae Kim, Hoon Kim, Jonghwan Kim, Changil Kwon, Jun Sung Kim and B. J. Kim (2021), “Direct observation of excitonic instability in Ta_2NiSe_5 ”, *Nature Communications*, **vol. 12**, 1969, <https://doi.org/10.1038/s41467-021-22133-z>.
- [9]. Yuan-Shan Zhang, Jan A. N. Bruin, Yosuke Matsumoto, Masahiko Isobe, Hidenori Takagi (2021), “Thermal transport signatures of the excitonic transition and associated phonon softening in the layered chalcogenide Ta_2NiSe_5 ”, *Physical Review B*, **vol. 104**, L121201, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.L121201>.
- [10] Yuh Tomio, Kotaro Honda, and Tetsuo Ogawa (2006), “Excitonic BCS-BEC crossover at finite temperature: Effects of repulsion and electron-hole mass difference”, *Physical Review B*, **vol. 73**, pp. 235108.
- [11] Franz X. Bronold and Holger Fehske (2006), “Possibility of an excitonic insulator at the semiconductor-semimetal transition”, *Physical Review B*, **vol. 74**, 165107.
- [12] Do Thi Hong Hai, Nguyen Thi Hau (2021), “Phase Diagrams of the Excitonic Insulator State: Analyzing the Excitonic Susceptibility”, *Journal of the Polish Mineral Engineering Society*, **Vol.1**, pp. 199-206.
- [13] Nguyen Thi Hau, Do Thi Hong Hai (2022), “Ảnh hưởng của áp suất ngoài lên sự hình thành trạng thái điện môi exciton trong các hợp chất đất hiếm chalcogenide”, *Hội nghị toàn quốc khoa học trái đất và tài nguyên với phát triển bền vững (ersd 2022)*, pp.1184-1189.
- [14] Van-Nham Phan, Klaus W. Becker, and Holger Fehske (2010), “Spectral signatures of the BCS-BEC crossover in the excitonic insulator phase of the extended Falicov-Kimball mode”, *Physical Review B*, **vol. 81**, 205117.
- [15] D. Ihle, M. Pfafferoth, E. Burovski, F. X. Bronold, H. Fehske (2008), “Bound state formation and the nature of the excitonic insulator phase in the extended Falicov-Kimball model”, *Physical Review B*, **vol. 78**, 193103.
- [16] Ninh Quoc-Huy, Phan Van-Nham (2021), “Mass Imbalance Effects in the Excitonic Condensation of the Extended Falicov-Kimball Model”, *Physica Status Solidi B*, 2000564, <https://doi.org/10.1002/pssb.202000564>.