



TUYỂN TẬP BÁO CÁO HỘI NGHỊ TOÀN QUỐC

KHOA HỌC TRÁI ĐẤT VÀ TÀI NGUYÊN VỚI PHÁT TRIỂN BỀN VỮNG (ERSD 2024)

HÀ NỘI 14 - 11 - 2024

ERSD 2024



NHÀ XUẤT BẢN GIAO THÔNG VẬN TẢI

ĐƠN VỊ TỔ CHỨC

Trường Đại học Mở - Địa chất (HUMG)

CÁC ĐƠN VỊ PHỐI HỢP TỔ CHỨC

Tập đoàn Công nghiệp Than - Khoáng sản Việt Nam

Tổng hội Địa chất Việt Nam

Cục Đo đạc, Bản đồ và Thông tin địa lý Việt Nam

Cục Bản đồ - Bộ Tổng tham mưu

Hội Cơ học Đá Việt Nam

Hội Công trình ngầm Việt Nam

Hội Dầu khí Việt Nam

Hội Địa chất Thủy văn Việt Nam

Hội Địa chất Công trình và Môi trường Việt Nam

Hội Địa chất Kinh tế Việt Nam

Hội Công nghệ Khoan - Khai thác Việt Nam

Hội Khoa học Kỹ thuật Địa vật lý Việt Nam

Hội Trắc địa - Bản đồ - Viễn thám Việt Nam

Hội Khoa học và Công nghệ Mỏ Việt Nam

Viện Khoa học Công nghệ Mỏ

BAN TỔ CHỨC

Trưởng ban

GS.TS Trần Thanh Hải, *Trường Đại học Mở Địa - chất*

Phó Trưởng ban

PGS.TS Triệu Hùng Trường, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

Ủy viên

GS.TS Võ Chí Mỹ, *Hội Trắc địa - Bản đồ - Viễn thám Việt Nam*

GS.TS Bùi Xuân Nam, *Hội Khoa học và Công nghệ Mỏ Việt Nam*

GS.TS Nguyễn Quang Phích, *Hội Công trình ngầm Việt Nam*

GS.TS Đỗ Như Tráng, *Hội Cơ học Đá Việt Nam*

PGS.TS Đỗ Ngọc Anh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Lê Hồng Anh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS. TS Đỗ Văn Bình, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Phạm Văn Hòa, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Nguyễn Văn Lâm, *Hội Địa chất Thủy văn Việt Nam*

PGS.TS Khổng Cao Phong, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Nguyễn Xuân Thảo, *Hội Công nghệ Khoan - Khai thác Việt Nam*

PGS.TS Đặng Trung Thành, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Tạ Đức Thịnh, *Hội Địa chất Công trình và Môi trường Việt Nam*

PGS.TS Lê Đức Tình, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Nguyễn Như Trung, *Hội Khoa học kỹ thuật Địa vật lý Việt Nam*

PGS.TS Nguyễn Thế Vinh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

TS Trần Thị Phúc An, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

TS Công Tiến Dũng, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

TS Nguyễn Tiến Dũng, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

TS Nguyễn Đại Đồng, *Cục Đo đạc, Bản đồ và Thông tin địa lý Việt Nam*

TS Đào Hồng Quảng, *Viện Khoa học Công nghệ Mỏ*

TS Nguyễn Quốc Thập, *Hội Dầu khí Việt Nam*

TS Bùi Thị Thu Thủy, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

TS Lê Ái Thụy, *Hội Địa chất Kinh tế Việt Nam*

TS Bùi Yên Tĩnh, *Cục Bản đồ - Bộ Tổng tham mưu*

BAN KHOA HỌC

Trưởng ban

PGS.TS Đỗ Ngọc Anh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

Phó trưởng ban

TS Nguyễn Thạc Khánh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

Ủy viên

GS.TSKH Hoàng Ngọc Hà, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
GS.TS Võ Trọng Hùng, *Hội Khoa học và Công nghệ Mở Việt Nam*
GS.TS Trương Xuân Luận, *Tổng Hội Địa chất Việt Nam*
GS.TS Bùi Xuân Nam, *Hội Khoa học và Công nghệ Mở Việt Nam*
GS.TS Đỗ Như Tráng, *Hội Cơ học Đá Việt Nam*
PGS.TS Lê Hồng Anh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Lê Ngọc Ánh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Đỗ Văn Bình, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Phạm Văn Hòa, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Phạm Văn Luận, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Nguyễn Quang Minh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Phạm Xuân Núi, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Không Cao Phong, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Ngô Xuân Thành, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Phạm Đức Thọ, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Lê Minh Thống, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Tạ Đức Thịnh, *Hội Địa chất Công trình và Môi trường Việt Nam*
PGS.TS Nguyễn Thế Vinh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Nguyễn Văn Xô, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Đỗ Như Ý, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Thị Mai Dung, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Công Tiến Dũng, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Đại Đồng, *Cục Đo đạc, Bản đồ và Thông tin địa lý Việt Nam*
TS Lê Quang Duyên, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Mạnh Hùng, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Duy Huy, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Cao Khải, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Quốc Phi, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Văn Phóng, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Bách Thảo, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Dương Thành Trung, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

BAN BIÊN TẬP

Trưởng ban

TS Nguyễn Thạc Khánh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

Phó Trưởng ban

PGS.TS Nguyễn Việt Nghĩa, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

Ủy viên

PGS.TS Phạm Văn Luận, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS. TS Phạm Đức Thọ, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

TS Tô Xuân Bản, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Thị Mai Dung, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Mạnh Hùng, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Khắc Long, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Quốc Phi, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Dương Thành Trung, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Ngô Thanh Tuấn, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

BAN THƯ KÝ

Trưởng ban

PGS.TS Đỗ Ngọc Anh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

Phó Trưởng ban

TS Nguyễn Thạc Khánh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

Ủy viên

PGS.TS Phạm Văn Luận, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
PGS.TS Phạm Đức Thọ, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Tô Xuân Bản, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Khắc Long, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Mạnh Hùng, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Nguyễn Duy Huy, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

TS Nguyễn Quốc Phi, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Ngô Thanh Tuấn, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
TS Dương Thành Trung, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
ThS Hoàng Thu Hằng, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
ThS Nguyễn Thanh Hải, *Trường Đại học Mở - Địa chất*
ThS Phạm Đức Nghiệp, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

WEBSITE HỘI THẢO

Thông tin chi tiết của Hội nghị Toàn quốc Khoa học Trái đất và Tài nguyên với Phát triển bền vững - ERSĐ 2024 được đăng tải trên trang Website chính thức của Hội nghị tại địa chỉ: <http://ersd.humg.edu.vn/>

ĐỊA CHỈ LIÊN HỆ

Phòng Khoa học công nghệ, Trường Đại học Mở - Địa chất, số 18 phố Viên, phường Đức Thắng, quận Bắc Từ Liêm, thành phố Hà Nội, Việt Nam. ĐT: (+84) 24.3838643

MỤC LỤC

Ban tổ chức hội nghị	i
Mục lục.....	iii
Lời nói đầu	v
Chương trình hội nghị	vii
Tiểu ban Dữ liệu lớn và chuyển đổi số trong khoa học trái đất, tài nguyên môi trường.....	1
Tiểu ban Trí tuệ nhân tạo, IOT, Blockchain và ứng dụng.....	38
Tiểu ban Cơ - Điện.....	71
Tiểu ban Dầu khí tích hợp.....	114
Tiểu ban Địa chất và tài nguyên du lịch.....	238
Tiểu ban Địa chất công trình - Địa kỹ thuật.....	312
Tiểu ban Địa chất thủy văn và Tài nguyên nước.....	430
Tiểu ban Tài nguyên địa chất và Quản lý bền vững.....	516
Tiểu ban Quản lý tài nguyên và Môi trường.....	597
Tiểu ban Công nghệ mới trong xử lý môi trường.....	730
Tiểu ban Phát triển bền vững khoa học công nghệ Mỏ và Môi trường.....	818
Tiểu ban Phát triển bền vững công nghiệp khai thác và Quản lý an toàn.....	899
Tiểu ban Những tiến bộ trong chế biến khoáng sản và tái chế.....	971
Tiểu ban Xây dựng công trình với phát triển bền vững.....	1039
Tiểu ban Kỹ thuật Trắc địa - Bản đồ và Hệ thống thông tin địa lý.....	1301
Tiểu ban Vật lý, Hóa học và ứng dụng.....	1384
Tiểu ban Toán, Cơ học và ứng dụng.....	1512
Tiểu ban Ngôn ngữ học.....	1634

LỜI NÓI ĐẦU

Hội nghị Toàn quốc Khoa học Trái đất và Tài nguyên với Phát triển bền vững (ERSD) được Trường Đại học Mở - Địa chất (HUMG) và các đối tác tổ chức 2 năm một lần với mục tiêu tạo ra một môi trường bổ ích để các nhà chuyên môn trong và ngoài nước tụ hội và giới thiệu những kết quả và hướng mới trong nghiên cứu khoa học, thảo luận về các xu thế phát triển, thách thức và cơ hội đối với nhiều lĩnh vực khác nhau của Khoa học Trái đất, Tài nguyên địa chất, khai thác, chế biến, sử dụng và quản lý tài nguyên địa chất, bảo vệ môi trường và các ngành khác có liên quan.

Tiếp nối thành công của các Hội nghị ERSD2018, ERSD2020, ERSD2022, Hội nghị Toàn quốc Khoa học Trái đất và Tài nguyên với Phát triển bền vững lần thứ tư (ERSD2024) được Trường Đại học Mở - Địa chất (HUMG) đăng cai tổ chức với sự tham gia đồng tổ chức của nhiều cơ quan quản lý, tổ chức nghiên cứu khoa học, đào tạo, và doanh nghiệp có uy tín trong nước gồm Tập đoàn Công nghiệp Than - Khoáng sản Việt Nam, Tổng hội Địa chất Việt Nam, Cục Đo đạc - Bản đồ và Thông tin địa lý Việt Nam, Cục Bản đồ - Bộ Tổng tham mưu, Hội Cơ học Đá Việt Nam, Hội Công trình ngầm Việt Nam, Hội Dầu khí Việt Nam, Hội Địa chất Thủy văn Việt Nam, Hội Địa chất Công trình và Môi trường Việt Nam, Hội Địa chất Kinh tế Việt Nam, Hội Công nghệ Khoan - Khai thác Việt Nam, Hội Khoa học Kỹ thuật Địa vật lý Việt Nam, Hội Trắc địa - Bản đồ - Viễn thám Việt Nam, Hội Khoa học và Công nghệ Mỏ Việt Nam, Viện Khoa học Công nghệ Mỏ và nhiều tổ chức và cá nhân khác.

Các chủ đề của Hội nghị tập trung vào nghiên cứu và ứng dụng khoa học công nghệ hướng tới phát triển bền vững đối với nhiều lĩnh vực khác nhau của Khoa học Trái đất và Tài nguyên thiên nhiên, Khai thác và sử dụng tài nguyên địa chất, Môi trường và các lĩnh vực khoa học khác có liên quan như Cơ - Điện, Công nghệ Thông tin, Xây dựng, ...

Trong quá trình tổ chức Hội nghị, Ban Tổ chức đã nhận được sự quan tâm của đông đảo các nhà khoa học, chuyên môn và quản lý trong và ngoài nước. Hơn 300 bản thảo báo cáo khoa học liên quan tới các chủ đề của Hội nghị đã được gửi tới Ban biên tập. Trên cơ sở đó, 269 báo cáo có chất lượng tốt đã được lựa chọn và xuất bản trong Tuyển tập các báo cáo toàn văn của Hội nghị với các chủ đề khoa học sau:

1. Dữ liệu lớn và chuyển đổi số trong khoa học trái đất, tài nguyên môi trường
2. Trí tuệ nhân tạo, IoT, Blockchain và ứng dụng
3. Cơ - Điện
4. Dầu khí tích hợp
5. Địa chất và Tài nguyên du lịch
6. Địa chất công trình - Địa kỹ thuật
7. Địa chất thủy văn và Tài nguyên nước
8. Tài nguyên địa chất và quản lý bền vững
9. Quản lý tài nguyên và môi trường
10. Công nghệ mới trong xử lý môi trường
11. Phát triển bền vững khoa học công nghệ mỏ và môi trường
12. Phát triển bền vững công nghiệp khai thác và quản lý an toàn
13. Những tiến bộ trong chế biến khoáng sản và tái chế
14. Xây dựng công trình với phát triển bền vững
15. Kỹ thuật Trắc địa - Bản đồ và Hệ thống thông tin địa lý
16. Vật lý, Hoá học và ứng dụng
17. Toán học, Cơ học và ứng dụng
18. Ngôn ngữ học

Toàn bộ thông tin khoa học về hội nghị được tích hợp vào Website chính thức của Hội nghị tại địa chỉ: <http://ersd.humg.edu.vn/>.

Ban tổ chức xin trân trọng cảm ơn Trường Đại học Mở - Địa chất, với tư cách là đơn vị đăng cai tổ chức Hội nghị, cùng các đơn vị đồng tổ chức đã hợp tác chặt chẽ và góp phần quan trọng vào việc tổ chức Hội nghị này. Cảm ơn các nhà khoa học và nhà chuyên môn đã đóng góp các công bố khoa học có giá trị cho Hội nghị. Ban tổ chức cũng đánh giá cao sự nỗ lực của các chuyên gia đọc bài đã có nhiều

nỗ lực và đóng góp để nâng cao chất lượng khoa học của các báo cáo, góp phần quan trọng vào thành công của hội nghị này.

Ban tổ chức mong muốn tiếp tục nhận được sự hợp tác chặt chẽ và góp ý chân thành của các đơn vị và cá nhân đối với việc chuẩn bị và tổ chức hội nghị, chất lượng báo cáo, biên tập, và xuất bản kỷ yếu hội nghị nhằm nâng cao chất lượng của các hội nghị tiếp theo, góp phần thúc đẩy sự phát triển bền vững của hoạt động nghiên cứu khoa học và trao đổi học thuật thuộc các lĩnh vực Khoa học Trái đất và Tài nguyên và các lĩnh vực khoa học khác có liên quan.

Hà Nội, tháng 11 năm 2024

THAY MẶT BAN TỔ CHỨC



GS.TS Trần Thanh Hải

Thăng giáng exciton ngoài trạng thái ngưng tụ trong hệ bán kim loại, bán dẫn ảnh hưởng bởi mất cân bằng khối lượng

Đỗ Thị Hồng Hải*, Nguyễn Thị Diệu Thu, Nguyễn Thị Hậu

Trường Đại học Mỏ - Địa chất

TÓM TẮT

Sự tồn tại của các exciton trước khi trạng thái ngưng tụ được thiết lập được khảo sát thông qua hàm cảm ứng exciton động trong mô hình Falicov-Kimball mở rộng có sự hiện diện của phonon. Sử dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn kết hợp với lý thuyết hàm Green, chúng tôi tìm ra biểu thức xác định hàm cảm ứng exciton. Từ kết quả tính số, giản đồ pha mô tả dấu hiệu thăng giáng exciton ảnh hưởng bởi mất cân bằng khối lượng ở trên điểm chuyển pha trạng thái ngưng tụ được thiết lập. Đặc biệt, đỉnh nhọn tần số thấp trong quang phổ phản ảo hàm cảm ứng exciton động khẳng định các exciton được hình thành trước khi ngưng tụ cả khi hệ trong pha bán dẫn và bán kim loại. Các kết quả của chúng tôi rất đáng giá trong việc hiểu rõ bản chất động học của chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton.

Từ khóa: hàm cảm ứng exciton; ngưng tụ exciton; mô hình Falicov-Kimball mở rộng; liên kết điện tử/lỗ trống - phonon; mất cân bằng khối lượng

1. Đặt vấn đề

Chuyển pha lượng tử của hệ các giả hạt boson luôn là một trong những vấn đề thu hút được nhiều sự quan tâm nghiên cứu trong vật lý hệ nhiều hạt. Exciton là giả hạt boson trung hòa về điện được hình thành do sự kết cặp của các lỗ trống dải hoá trị với các điện tử dải dẫn nhờ tương tác tĩnh điện. Khi hệ được làm lạnh xuống nhiệt độ tới hạn, các exciton sẽ ngưng tụ và tồn tại trong trạng thái lượng tử được đề xuất về mặt lý thuyết từ hơn nửa thế kỷ trước (Mott, 1961). Tuy nhiên, bản chất động học cũng như cơ chế chuyển pha trạng thái ngưng tụ của exciton vẫn còn gây tranh cãi. Việc gia tăng các dữ liệu đo đạc thực nghiệm trong những năm gần đây đã củng cố các dự đoán lý thuyết về sự tồn tại trạng thái ngưng tụ của các exciton và thu hút nhiều sự tập trung nghiên cứu (Subedi, A., 2020; Kim, M. J. và nnk, 2020; Ye, M. và nnk, 2021; Volkov, P. A. và nnk, 2021; Zhang, Y. S. và nnk, 2021; Ejima, S. và nnk, 2021).

Sự kết cặp điện tử - lỗ trống hình thành exciton và trạng thái ngưng tụ của nó thường được nghiên cứu về mặt lý thuyết thông qua sử dụng các mô hình hai dải năng lượng mà tiêu biểu là mô hình Falicov-Kimball mở rộng (Extended Falicov-Kimball – EFK) (Ninh, Q. H., Phan, V. N., 2021; Kaneko, T. và nnk, 2013, Ejima, S. và nnk, 2021). Tuy nhiên, EFK là mô hình thuần túy điện tử tức là chỉ quan tâm đến tương tác tĩnh điện giữa điện tử với lỗ trống. Trong khi đó, các nghiên cứu thực nghiệm đã cho thấy phonon cũng tham gia vào hỗ trợ sự kết cặp điện tử - lỗ trống và thiết lập trạng thái ngưng tụ của exciton. Ví dụ trong một số vật liệu như $\text{TmSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$ (Wachter, 2018), $\text{Ta}_2\text{Ni}(\text{Se}_{1-x}\text{S}_x)_5$ (Ye, M. và nnk, 2021) hay Ta_2NiSe_5 (Volkov, P. A. và nnk, 2021; Zhang, Y. S. và nnk, 2021), các kết quả đo đạc thực nghiệm cho thấy exciton có thể hình thành và ngưng tụ ở nhiệt độ đủ thấp nhờ sự hỗ trợ của phonon. Do vậy, để nhận được kết quả phù hợp với thực nghiệm và mô tả hệ exciton gần với hệ thực nhất, liên kết điện tử/lỗ trống với phonon cần phải được đưa vào mô hình và tính toán một cách kỹ lưỡng.

Với hệ exciton, các quan sát thực nghiệm đã khẳng định các tính chất động học của hệ có liên hệ mật thiết với sự tồn tại cấu trúc pha phức tạp trong hệ. Xung quanh điểm chuyển pha, các tính chất thăng giáng đóng vai trò hết sức quan trọng. Do đó, để có thể hiểu một cách sâu sắc về sự hình thành exciton và quá trình chuyển pha trạng thái ngưng tụ của nó, các tính chất động học cần phải được xem xét kỹ lưỡng, đặc biệt ở lân cận điểm chuyển pha ngưng tụ. Hơn nữa, mối tương quan về khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống ảnh hưởng đáng kể đến sự ổn định của trạng thái ngưng tụ exciton (Conti, S. và nnk, 2020; Ejima, S. và nnk, 2014). Trong bài báo này, chúng tôi xem xét sự tồn tại của các exciton trước khi trạng thái ngưng tụ được thiết lập ảnh hưởng bởi mất cân bằng khối lượng điện tử/lỗ trống thông qua sử dụng

* Tác giả liên hệ

Email: dothihonghai@humg.edu.vn

mô hình EFK có sự hiện diện của phonon. Bằng việc áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn kết hợp với lý thuyết hàm Green, biểu thức giải tích của hàm cảm ứng exciton đã được rút ra. Từ kết quả tính số phần ảo của hàm cảm ứng exciton động, giản đồ pha mô tả dấu hiệu thăng giáng exciton ảnh hưởng bởi mất cân bằng khối lượng ở trên điểm chuyển pha trạng thái ngưng tụ được thiết lập. Nhờ đó, bản chất động học của chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton có thể được sáng tỏ, đồng thời cũng cổ những quan sát thực nghiệm về sự hình thành của exciton ngoài trạng thái ngưng tụ (Sugimoto, K. và nnk, 2018; Lee, Jinwon và nnk, 2019).

Ngoài phần mở đầu và kết luận, bài báo gồm 2 phần. Trong đó, mô hình EFK hai chiều có sự hiện diện của phonon và phương pháp tính toán lý thuyết để tìm ra biểu thức giải tích hàm cảm ứng exciton được trình bày trong phần 2. Bằng phương pháp tính số, các giá trị cụ thể của phần ảo hàm cảm ứng exciton động khi thay đổi các tham số của mô hình được tìm thấy. Phần 3 của bài báo trình bày các giản đồ pha thiết lập được từ kết quả tính số và những thảo luận về các kết quả đó.

2. Mô hình và phương pháp lý thuyết

Để nghiên cứu lý thuyết về chuyển pha trạng thái ngưng tụ của các exciton trong vật liệu bán kim loại, bán dẫn, chúng ta xét mô hình EFK hai chiều có liên kết điện tử/lỗ trống - phonon với Hamiltonian được viết trong không gian xung lượng dưới dạng sau

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} (E_0 p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}}^e e_{\mathbf{k}}^\dagger e_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}}^h h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}}) - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{q}} e_{\mathbf{k}}^\dagger e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} h_{\mathbf{k}_1}^\dagger h_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}} + \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} [e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}}^\dagger (p_{-\mathbf{q}}^\dagger + p_{\mathbf{q}}) + h_{-\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (p_{\mathbf{q}}^\dagger + p_{-\mathbf{q}})] \quad (1)$$

trong đó, $e_{\mathbf{k}}^\dagger$, $h_{\mathbf{k}}^\dagger$ và $p_{\mathbf{k}}^\dagger$ lần lượt là các toán tử sinh điện tử ở dải dẫn, lỗ trống ở dải hóa trị và phonon tại xung lượng \mathbf{k} ; $\epsilon_{\mathbf{k}}^{e(h)}$ là năng lượng tán sắc của điện tử và lỗ trống. Trong gần đúng liên kết chặt, các năng lượng này được cho bởi

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{e(h)} = \epsilon^{e(h)} - t^{e(h)} \gamma_{\mathbf{k}} - \mu \quad (2)$$

với $\gamma_{\mathbf{k}} = 2(\cos k_x + \cos k_y)$ trong mạng vuông hai chiều gồm N nút mạng, $\epsilon^{e(h)}$ là năng lượng tại nút của điện tử (lỗ trống), $t^{e(h)}$ là tích phân nhảy nút giữa hai nút liền kề của điện tử (lỗ trống) và μ là thế hóa học. Mỗi quan hệ giữa t^e và t^h biểu thị mối tương quan về khối lượng hiệu dụng giữa điện tử và trống. Do đó, để đơn giản khi tính số, người ta thường chọn $t^e = 1$ và được xem là đơn vị của năng lượng. Khi đó, các đại lượng còn lại đều được tính theo đơn vị của t^e và giá trị của t^h sẽ thể hiện sự chênh lệch về khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống. Trong công thức (1), số hạng đầu tiên thể hiện Hamiltonian không tương tác của hệ điện tử, lỗ trống và phonon có năng lượng không tán sắc E_0 . Hai số hạng cuối cùng trong công thức (1) lần lượt biểu thị Hamiltonian tương tác Coulomb giữa các điện tử - lỗ trống với U là thế tương tác tĩnh điện Coulomb và Hamiltonian tương tác của hệ điện tử - lỗ trống - phonon với g là hằng số liên kết điện tử/lỗ trống - phonon.

Áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn và bỏ qua các số hạng vô cùng bé, Hamiltonian (1) được viết lại như sau

$$\mathcal{H}_{\square}^{UHF} = \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}}^e e_{\mathbf{k}}^\dagger e_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}^h h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}} + E_0 p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}}) + \Lambda \sum_{\mathbf{k}} (e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}}^\dagger + h_{-\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) + \sqrt{N} \Delta (p_{-\mathbf{q}}^\dagger + p_{\mathbf{q}}) \quad (3)$$

ở đây, năng lượng tán sắc của các điện tử đã bao gồm sự đóng góp của tương tác Coulomb biểu thị sự dịch chuyển Hartree của dải hóa trị và dải dẫn dưới ảnh hưởng của tương tác Coulomb

$$E_{\mathbf{k}}^h = \epsilon_{\mathbf{k}}^h - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} \langle e_{\mathbf{k}_1}^\dagger e_{\mathbf{k}_1} \rangle \quad (4)$$

$$E_{\mathbf{k}}^e = \epsilon_{\mathbf{k}}^e - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} \langle h_{\mathbf{k}_1}^\dagger h_{\mathbf{k}_1} \rangle \quad (5)$$

Trong trường hợp không xảy ra ngưng tụ exciton, mọi tham số trật tự trạng thái ngưng tụ đều triệt tiêu. Khi đó, các mật độ hạt được đánh giá đơn giản thông qua các hàm phân bố Fermi-Dirac dưới dạng: $\sum_{\mathbf{k}} \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle / N = \sum_{\mathbf{k}} n^F(E_{\mathbf{k}}^\alpha) / N$ là mật độ điện tử (khi $\alpha = e$) và mật độ lỗ trống (khi $\alpha = h$). Ở đây, $n_F(E_{\mathbf{k}}^\alpha) = (1 + e^{\beta E_{\mathbf{k}}^\alpha})^{-1}$ với β là nghịch đảo của nhiệt độ T .

Trong Hamiltonian (3), các trường thêm vào để phá vỡ đối xứng tự phát liên quan đến sự ổn định của trạng thái ngưng tụ exciton có dạng

$$\Lambda = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[2g \langle p_{\mathbf{q}} \rangle - \frac{U}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \langle e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}}^\dagger \rangle \right] \quad (6)$$

$$\Delta = \frac{g}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}}^\dagger + h_{-\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \quad (7)$$

Λ và Δ là tham số đặc trưng cho sự tồn tại trạng thái ngưng tụ của exciton bởi có chứa số hạng $\langle e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}}^\dagger \rangle$ biểu thị sự kết cặp của các điện tử - lỗ trống và gây ra trạng thái ngưng tụ. Khi các tham số này khác không khẳng định các exciton trong hệ ổn định ở trạng thái ngưng tụ. Việc khảo sát sự hình thành exciton và trạng thái ngưng tụ của chúng thông qua xem xét tính chất của các tham số Λ và Δ đã được chúng tôi thực hiện gần đây (Thi-Hong-Hai-Do và nnk, 2017; Thi-Hong-Hai-Do và nnk, 2019; Đỗ Thị Hồng Hải và Phan Văn Nhâm, 2020). Tuy nhiên, để có cái nhìn tổng quan nhất về sự hình thành exciton và thiết lập trạng thái ngưng tụ của chúng cần thiết phải khảo sát kỹ lưỡng cả trên và dưới điểm chuyển pha.

Trong bài báo này, chúng tôi phân tích bản chất động học của chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton thông qua khảo sát sự tồn tại của các exciton trước khi trạng thái ngưng tụ được thiết lập. Một trong những đại lượng thường được xem xét trong trường hợp này là hàm cảm ứng exciton động. Thật vậy, phần ảo của hàm cảm ứng exciton động biểu thị sự thăng giáng kết hợp điện tử - lỗ trống trước khi trạng thái ngưng tụ của các exciton ổn định. Hàm cảm ứng exciton được định nghĩa theo lý thuyết phản hồi tuyến tính như sau

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \langle h_{-\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} | e_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}'}^\dagger \rangle \rangle_\omega \quad (8)$$

Bằng cách sử dụng phương trình chuyển động cho hàm Green hai hạt dựa trên Hamiltonian (1) ta nhận được

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle h_{-\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} | e_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}'}^\dagger \rangle \rangle_\omega &= 1 - \langle n_{\mathbf{k}}^h \rangle - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^e \rangle + (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^e + \epsilon_{\mathbf{k}}^h) \langle \langle h_{-\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} | e_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}'}^\dagger \rangle \rangle_\omega \\ &- \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}'} \langle \langle (h_{-\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} h_{\mathbf{k}_1}^\dagger h_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}'} + e_{\mathbf{k}_1}^\dagger e_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'} h_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}'}^\dagger e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) | e_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}'}^\dagger \rangle \rangle_\omega \\ &+ \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}'} \langle \langle (h_{-\mathbf{k}} h_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}+\mathbf{q}'} - e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) (p_{-\mathbf{q}'}^\dagger + p_{\mathbf{q}'}) | e_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}'}^\dagger \rangle \rangle_\omega \end{aligned} \quad (9)$$

Từ đây ta thấy xuất hiện các hàm Green bậc cao hơn. Tiếp tục viết phương trình chuyển động cho các hàm Green mới này và kết hợp với gần đúng pha ngẫu nhiên, chúng ta nhận được biểu thức hàm cảm ứng exciton dưới dạng sau

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-\chi^{0ex}(\mathbf{q}, \omega)}{1 + (U - 2g^2 V_{\mathbf{q}}) \chi^{0e}(\mathbf{q}, \omega)} \quad (10)$$

trong đó $\chi^{0ex}(\mathbf{q}, \omega)$ đóng vai trò như hàm cảm ứng exciton trần có dạng

$$\chi^{0ex}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - n_F(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^e) - n_F(E_{\mathbf{k}}^h)}{\omega + i0^+ - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^e - E_{\mathbf{k}}^h} \quad (11)$$

và

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{E_0}{(\omega + i0^+)^2 - E_0^2 - \frac{2g^2 E_0 \chi^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 + U \chi^0(\mathbf{q}, \omega)}} \quad (12)$$

với

$$\chi^0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - n_F(E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^e) - n_F(E_{\mathbf{k}}^h)}{\omega + i0^+ + E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^e + E_{\mathbf{k}}^h} \quad (13)$$

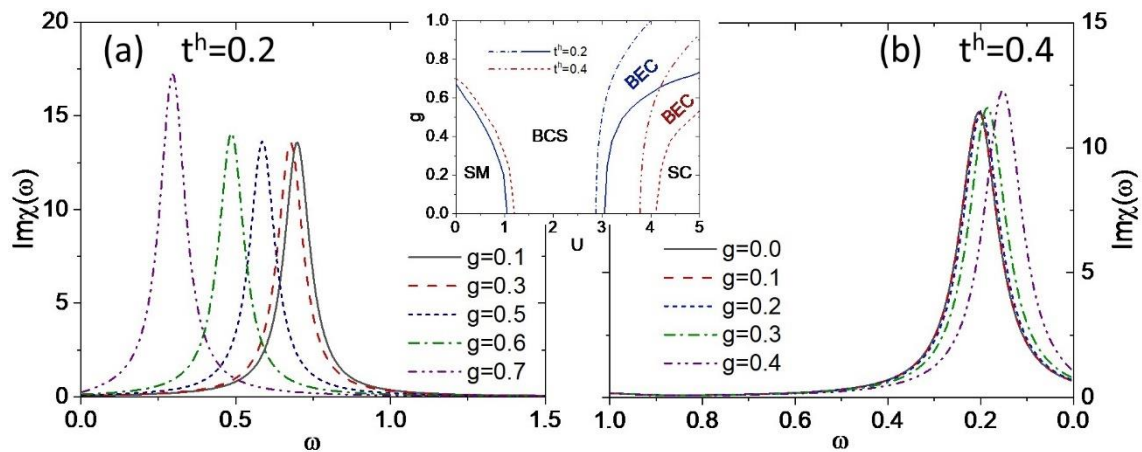
Trong bài báo này, tính chất động học của chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton hay sự tồn tại của các exciton trước khi trạng thái ngưng tụ exciton ổn định được xem xét thông qua khảo sát phần ảo của hàm cảm ứng exciton động $Im\chi(\mathbf{q}, \omega)$. Các dữ liệu đo đạc thực nghiệm (Kim, Kwangrae và nnk, 2021; Zhang, Y. S. và nnk, 2021; Volkov, P. A. và nnk, 2021) cũng như các kết quả nghiên cứu lý thuyết (Thi-Hong-Hai Do and Van-Nham Phan, 2022) công bố gần đây đã khẳng định các exciton có xung lượng $\mathbf{q} = 0$ tham gia nhiều nhất vào việc thiết lập trạng thái ngưng tụ trong vật liệu Ta_2NiSe_5 . Do vậy, trong nghiên cứu này, chúng tôi chỉ tập trung khảo sát tính chất của phần ảo của hàm cảm ứng exciton động được xác định ở công thức (10) tại xung lượng $\mathbf{q} = 0$.

3. Kết quả và thảo luận

Để xem xét sự tồn tại của các exciton trước khi trạng thái ngưng tụ ổn định ảnh hưởng bởi mất cân bằng khối lượng, trong phần này chúng tôi biểu thị các gián đoạn pha nhận được từ kết quả tính số phần ảo của hàm cảm ứng exciton động $Im\chi(\mathbf{q}, \omega)$ được xác định ở công thức (10). Chương trình tính số được

thiết lập với việc chọn $t^e = 1$ là đơn vị của năng lượng và thay đổi t^h để thể hiện sự mất cân bằng khối lượng giữa các lỗ trống ở dải hóa trị với các điện tử ở dải dẫn. Ở đây, giá trị của tích phân nhảy nút của lỗ trống được lựa chọn sao cho $t^h < t^e$ thể hiện lỗ trống nặng hơn, định xứ hơn điện tử. Trong nghiên cứu này, chúng tôi tính toán số với hệ hai chiều có số nút mạng $N = 200 \times 200$ và thế hóa μ được thay đổi nhưng luôn đảm bảo tổng mật độ hạt điện tử và lỗ trống $\sum_{\mathbf{k}, \alpha=e,h} \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle / N = 1$ tức là xét hệ trong trường hợp lấp đầy một nửa. Không mất tính tổng quát, chúng tôi cố định năng lượng không tán sắc của phonon $E_0 = 2$ và hiệu hai mức năng lượng dải dẫn và dải hóa trị $E^e - E^h = 2$.

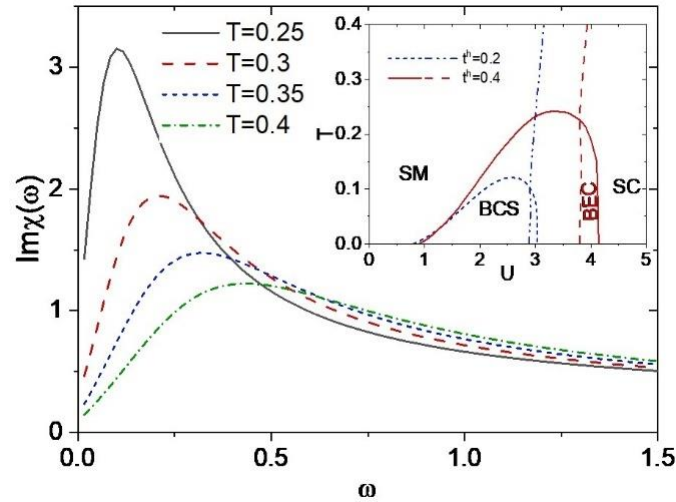
Hình 1 biểu thị phần ảo của hàm cảm ứng exciton động tại xung lượng không $Im\chi(\omega) \equiv Im\chi(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \omega)$ khi thay đổi hằng số liên kết điện tử/lỗ trống - phonon g ứng với hai giá trị của tích phân nhảy nút của lỗ trống t^h tại nhiệt độ không và thế tương tác Coulomb $U = 4,5$. Với tập hợp các tham số được lựa chọn ở đây, hệ ổn định trong pha bán dẫn với dải dẫn và dải hóa trị cách xa nhau và hàm cảm ứng exciton động sẽ biểu thị sự tồn tại của các exciton trước khi trạng thái ngưng tụ trở nên ổn định. Hình 1a cho thấy với $t^h = 0,2$, đỉnh nhọn đơn tần số thấp luôn xuất hiện trong quang phổ của phần ảo hàm cảm ứng exciton động ứng với toàn bộ các giá trị của hằng số liên kết g được lựa chọn. Điều này biểu thị sự tồn tại của trạng thái kết hợp của các exciton đã được hình thành ở trong chất bán dẫn trước khi hệ chuyển sang trạng thái ngưng tụ exciton. Tăng hằng số liên kết điện tử - phonon, đỉnh phổ dịch chuyển sang trái với cường độ cao hơn và bề rộng gần như không đổi thể hiện xu hướng ổn định trạng thái ngưng tụ exciton khi g đủ lớn. Điều này hoàn toàn phù hợp với giản đồ pha trong hình nhỏ ở giữa Hình 1 thể hiện sự ngưng tụ của các exciton dưới ảnh hưởng của liên kết điện tử/lỗ trống - phonon và cũng đã được thảo luận trong các tài liệu (Subedi, A., 2020; Yan, J. và nnk, 2019). Hình nhỏ ở giữa Hình 1 cho thấy với $U = 4,5$ và $t^h = 0,2$, trạng thái ngưng tụ exciton được thiết lập khi hằng số liên kết điện tử - phonon $g \geq 0,8$. Tăng t^h tức là giảm mất cân bằng khối lượng, chẳng hạn khi $t^h = 0,4$, Hình 1b vẫn cho thấy đỉnh nhọn cường độ cao xuất hiện trong quang phổ của phần ảo hàm cảm ứng exciton động. Vị trí đỉnh dịch chuyển về phía tần số thấp hơn khi tăng g thể hiện xu hướng cộng hưởng exciton. Tuy nhiên, với $g > 0,4$, hệ đã có thể chuyển từ trạng thái bán dẫn sang trạng thái ngưng tụ exciton. Điều này khẳng định sự mất cân bằng khối lượng điện tử - lỗ trống có ảnh hưởng đáng kể lên sự tồn tại của exciton trong hệ bán dẫn nhiệt độ thấp trước khi trạng thái ngưng tụ được thiết lập. Khi mất cân bằng khối lượng nhỏ hay các lỗ trống trở nên linh hoạt hơn làm tăng khả năng kết cặp điện tử - lỗ trống hình thành exciton nên chỉ cần liên kết điện tử-phonon nhỏ cũng có thể hỗ trợ sự ghép cặp.



Hình 1. Hàm cảm ứng exciton động ứng với hai giá trị của tích phân nhảy nút của lỗ trống t^h khi thay đổi hằng số liên kết g tại $U = 4,5$ và $T=0$. Hình nhỏ biểu thị giản đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton trong mặt phẳng (U, g) ứng với 2 giá trị của t^h

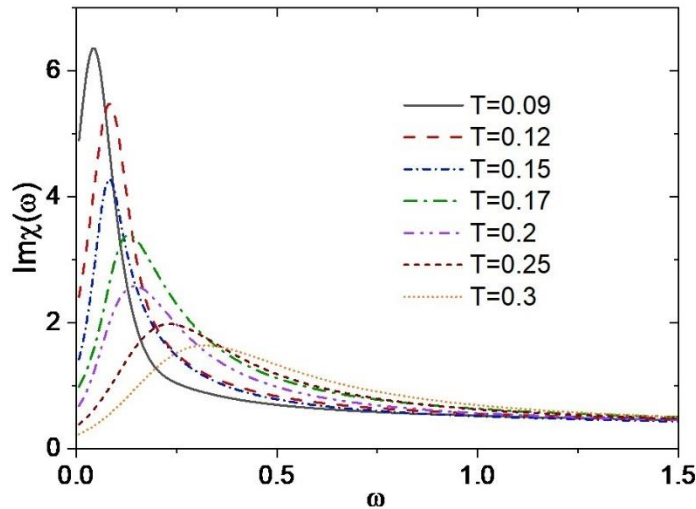
Tiếp theo, chúng tôi xem xét ảnh hưởng của nhiệt độ lên sự tồn tại của các exciton ở trên điểm chuyển pha ngưng tụ exciton. Hình 2 biểu thị phần ảo của hàm cảm ứng exciton động với các giá trị khác nhau của nhiệt độ khi $t^h = 0,4$, $g = 0,2$ và $U = 3$. Trong phạm vi của các tham số này, hệ ổn định trong pha bán kim loại với dải dẫn và dải hóa trị xen phủ nhau. Giản đồ pha trong hình nhỏ của Hình 2 cho thấy, hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ exciton dạng BCS khi nhiệt độ đủ thấp. Khi $T \geq 0,25$, hệ tồn tại trong pha bán kim loại nhiệt độ cao với đỉnh đơn xuất hiện trong quang phổ phần ảo hàm cảm ứng exciton động. Tuy nhiên, cường độ đỉnh thấp và bề rộng lớn, đặc biệt đỉnh phổ trải dài với cường độ thấp ở nhiệt độ cao

thể hiện thăng giáng exciton là không đáng kể. Giảm nhiệt độ, cường độ đỉnh tăng lên và vị trí đỉnh dịch về phía tần số thấp. Sự xuất hiện của cực đại năng lượng thấp trong quang phổ phần ảo hàm cảm ứng exciton động biểu thị sự cộng hưởng của các trạng thái kết hợp exciton hình thành trước đó. Dấu hiệu dịch đỉnh phổ cũng cho thấy xu hướng xuất hiện trạng thái ngưng tụ exciton khi nhiệt độ đạt tới giá trị tới hạn. Điều này khẳng định sự tồn tại của các cặp điện tử - lỗ trống hay exciton trong trạng thái bán kim loại thông thường trước khi trạng thái ngưng tụ exciton được thiết lập. Kết quả này trái với các quan điểm trước đó của Bronold và Fehske là các exciton đồng thời hình thành và ngưng tụ ở pha bán kim loại còn ở pha bán dẫn thì exciton hình thành trước khi ngưng tụ (Bronold, F. X. và Fehske, H., 2006). Tuy nhiên,



nó lại hoàn toàn phù hợp với các kết quả nghiên cứu thực nghiệm gần đây ở hệ bán kim loại Ta_2NiSe_5 (Sugimoto, K. và nnk, 2018; Lee, Jinwon và nnk, 2019).

Hình 2. Hàm cảm ứng exciton động khi nhiệt độ thay đổi ứng với $t^h = 0,4$ tại $U = 3, g = 0,2$. Hình nhỏ biểu thị giản đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton trong mặt phẳng (U, T) ứng với 2 giá trị của t^h .



Hình 3. Hàm cảm ứng exciton động khi nhiệt độ thay đổi ứng với $t^h = 0,2$ tại $U = 3, g = 0,2$

Cuối cùng, trên Hình 3 chúng tôi biểu thị phần ảo của hàm cảm ứng exciton động với các giá trị khác nhau của nhiệt độ khi $t^h = 0,2, g = 0,2$ và $U = 3$. Với tập hợp các tham số này, giản đồ pha trong hình nhỏ của Hình 2 cho thấy, hệ ổn định trong pha bán dẫn khi nhiệt độ thấp, còn khi nhiệt độ cao, hệ tồn tại trong pha bán kim loại. Thật vậy, Hình 3 cho thấy với nhiệt độ cao, $T \geq 0,2$, phần ảo của hàm cảm ứng exciton động có đỉnh phổ cường độ thấp và mở rộng thể hiện sự tồn tại ít nhiều của các trạng thái kết hợp exciton trong pha bán kim loại. Giảm nhiệt độ, đỉnh phổ dịch chuyển dần sang trái xuống tần số thấp hơn với bề rộng thu hẹp lại và cường độ đỉnh tăng lên rất nhanh khẳng định sự tồn tại của các exciton liên kết

chặt. Dấu hiệu của đỉnh phổ cường độ cao ở đây thể hiện sự gia tăng mạnh mẽ của các exciton liên kết chặt trong trạng thái bán dẫn trước khi xảy ra quá trình chuyển pha ngưng tụ exciton. Điều đó tương ứng với sự hình thành của các exciton bên ngoài trạng thái ngưng tụ trong chất bán dẫn. Và khi nhiệt độ đủ thấp dưới nhiệt độ tới hạn, trạng thái ngưng tụ exciton sẽ được thiết lập. Rõ ràng là dấu hiệu của sự tồn tại trạng thái kết hợp exciton trở nên rõ nét hơn khi hệ chuyển sang pha bán dẫn. Trong trường hợp này, $t^h = 0,2$ tức là mất cân bằng khối lượng lớn, lỗ trống định xứ hơn nên sự lai hóa giữa các điện tử và lỗ trống khó xảy ra hơn làm cho vùng ngưng tụ exciton bị thu hẹp lại (xem hình nhỏ của Hình 2). Do đó các trạng thái kết hợp exciton cũng chỉ xuất hiện ở nhiệt độ thấp. Những kết quả nghiên cứu này của chúng tôi một lần nữa đã củng cố những quan sát thực nghiệm về sự hình thành của exciton ngoài trạng thái ngưng tụ trên vật liệu bán kim loại (Sugimoto, K. và nnk, 2018; Lee, Jinwon và nnk, 2019).

4. Kết luận

Như vậy, trong bài báo này, sự tồn tại của các exciton ở trên điểm chuyển pha ngưng tụ trong vật liệu bán kim loại, bán dẫn ảnh hưởng bởi chênh lệch khối lượng hiệu dụng giữa điện tử và lỗ trống đã được nghiên cứu thông qua khảo sát phần ảo của hàm cảm ứng exciton động. Áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn kết hợp lý thuyết hàm Green cho mô hình Falicov-Kimball mở rộng có sự hiện diện của phonon, công thức xác định hàm cảm ứng exciton đã được tìm thấy. Thực hiện chương trình tính số khảo sát phần ảo của hàm cảm ứng exciton động theo tích phân nhảy nút của lỗ trống và nhiệt độ, kết quả cho thấy các dấu hiệu của sự tồn tại trạng thái kết hợp exciton ở trên các điểm chuyển pha. Trong trạng thái bán kim loại với liên kết điện tử/lỗ trống - phonon đủ lớn và ở nhiệt độ gần nhiệt độ chuyển pha, một đỉnh ưu thế ở tần số thấp xuất hiện trong quang phổ của phần ảo hàm cảm ứng exciton động cho biết khả năng xảy ra hiện tượng ngưng tụ exciton. Dấu hiệu này được củng cố đáng kể khi hệ ở trong trạng thái bán dẫn, quang phổ phần ảo của hàm cảm ứng exciton động xuất hiện một đỉnh cường độ rất cao ở năng lượng thấp. Điều đó chỉ rõ xu hướng ổn định của trạng thái ngưng tụ exciton khi nhiệt độ đạt tới giá trị tới hạn. Khi mất cân bằng khối lượng nhỏ, các lỗ trống trở nên linh hoạt hơn làm tăng khả năng kết cặp điện tử - lỗ trống hình thành exciton nên chỉ cần liên kết điện tử-phonon nhỏ hay ở nhiệt độ cao cũng có thể hỗ trợ sự ghép cặp hình thành exciton trong hệ.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 103.01-2023.43.

Tài liệu tham khảo

- Bronold, F. X. and Fehske, H., 2006. Possibility of an excitonic insulator at the semiconductor-semimetal transition. *Phys. Rev. B* 74: 165107.
- Conti, S., Neilson, D., Peeters, F. M., Perali, A., 2020. Transition Metal Dichalcogenides as Strategy for High Temperature Electron-Hole Superfluidity. *Condens. Matter* 5, 22.
- Ejima, S., Kaneko, T., Ohta, Y., Fehske, H., 2014. Order, Criticality, and Excitations in the Extended Falicov-Kimball Model. *Phys. Rev. Lett.*, 112, 026401.
- Ejima, S., Lange, F. and Fehske, H., 2021. Finite-temperature photoemission in the extended Falicov-Kimball model: a case study for Ta₂NiSe₅. *Sci Post Phys.* 10 77.
- Đỗ Thị Hồng Hải và Phan Văn Nhâm, 2020. Chuyển pha trạng thái điện môi exciton/sóng mật độ điện do thăng giáng nhiệt trong vật liệu bán kim loại. *Tạp chí Khoa học và Công nghệ Đại học Duy Tân* 3 (40), 48–54.
- Kaneko, T., Toriyama, T., Konishi, T., Ohta, Y., 2013. Orthorhombic-to-monoclinic phase transition of Ta₂NiSe₅ induced by the Bose-Einstein condensation of excitons. *Phys. Rev. B*, 87:035121.
- Kim, Kwangrae *et al.*, 2021. Direct observation of excitonic instability in Ta₂NiSe₅. *Nat. Commun.*, 12:1969.
- Kim, M. J., *et al.*, 2020. Phononic soft mode behavior and a strong electronic background across the structural phase transition in the excitonic insulator Ta₂NiSe₅. *Phys. Rev. Res.* 2 042039(R).
- Lee, Jinwon *et al.*, 2019. Strong interband interaction in the excitonic insulator phase of Ta₂NiSe₅. *Physical Review B* 99: 075408.
- Mott, N. F., 1961. The transition to the metallic state. *Philos. Mag.*, 6:287
- 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.
- Subedi, A., 2020. Orthorhombic-to-monoclinic transition in Ta₂NiSe₅ due to a zone-center optical phonon instability. *Phys. Rev. Mater.* 4 083601.
- Sugimoto, K. *et al.*, 2018. Strong Coupling Nature of the Excitonic Insulator State in Ta₂NiSe₅. *Phys.*

Rev. Lett. 120: 247602.

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.

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 $\text{TmSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$, Chapter 2, In book: *Excitons*, Intech Open, London, UK.

Yan, J. *et. al.*, 2019. Strong electron-phonon coupling in the excitonic insulator Ta_2NiSe_5 . *Inorg. Chem.* 58 9036.

Ye, M. *et. al.*, 2021. Lattice dynamics of the excitonic insulator $\text{Ta}_2\text{Ni}(\text{Se}_{1-x}\text{S}_x)_5$. *Phys. Rev. B* 104 045102

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

Effect of mass imbalance on the excitonic fluctuation outside the condensed state in semimetallic and semiconducting systems

Do Thi Hong Hai*, Nguyen Thi Dieu Thu, Nguyen Thi Hau

Hanoi University of Mining and Geology

In this paper, we investigate the existence of excitons before the condensation state is established through the dynamical excitonic susceptibility function in the extended Falicov-Kimball model in the presence of phonons. By using the unrestricted Hartree-Fock approximation combined with Green's function theory, the analytical expression of the excitonic susceptibility function was found. From the numerical results, the phase diagrams addressing the excitonic fluctuation affected by mass imbalance above the phase transition point of the excitonic condensation state in the semimetallic and semiconducting system is established. In particular, the sharp low-frequency peak in the imaginary part spectrum of the dynamical excitonic susceptibility function confirms the existence of excitons outside the condensed state even when the system is in the semimetallic phase. Our results are valuable in understanding the dynamics of the exciton condensation phase transition

Keywords: excitonic susceptibility function; excitonic condensed; extended Falicov-Kimball model; electron/hole-phonon coupling; mass imbalance

Ảnh hưởng của tương tác điện tử - photon lên trạng thái ngưng tụ exciton-polariton trong vi hốc bán dẫn

Nguyễn Thị Hậu^{1,2}, Đỗ Thị Hồng Hải^{1,*}, Phan Văn Nhân³

¹Trường Đại học Mở - Địa chất

²Học viện Khoa học và công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam

³Trường Đại học Duy Tân

TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của tương tác điện tử - photon lên trạng thái ngưng tụ exciton-polariton trong vi hốc bán dẫn. Các phương trình tự hợp xác định các tham số trật tự mô tả các trạng thái ngưng tụ exciton, polariton và photon trong hệ được xác định từ phép tính gần đúng Hartree-Fock trong mô hình 2 chiều mô tả hệ điện tử, lỗ trống và photon trong cấu trúc vi hốc. Kết quả khẳng định sự tồn tại của trạng thái ngưng tụ exciton-polariton ở nhiệt độ đủ nhỏ khi có mặt của tương tác điện tử - photon. Nhiệt độ chuyển pha trạng thái ngưng tụ tăng khi tăng mật độ kích thích và cường độ tương tác điện tử - photon.

Từ khóa: Exciton; Polariton; ngưng tụ Bose-Einstein; vi hốc bán dẫn, tương tác điện tử - photon

1. Đặt vấn đề

Ngưng tụ Bose-Einstein (BEC – Bose-Einstein condensation) là một trạng thái trật tự xuất hiện ở các hệ hạt hoặc giả hạt boson với một lượng lớn các hạt cùng tồn tại trong một trạng thái lượng tử duy nhất. Điều này xảy ra khi mật độ hạt/giả hạt boson đủ lớn và được làm lạnh tới nhiệt độ thấp hơn nhiệt độ tới hạn T_c (T_c còn được gọi là nhiệt độ chuyển pha trạng thái BEC). Nhiệt độ chuyển pha T_c càng lớn nếu khối lượng các hạt boson càng nhỏ. Do đó, để quan sát được trạng thái BEC đòi hỏi hệ các hạt boson phải có khối lượng đủ nhỏ và thời gian sống đủ lớn. Exciton-polariton trong vi hốc bán dẫn là một hệ giả hạt boson được tạo thành do sự lai hóa của các exciton trong giếng lượng tử bán dẫn và các photon bị giam giữ trong vi hốc (Weisbuch và nnk, 1992). Với khối lượng rất nhỏ (cỡ 10^{-5} khối lượng của điện tử tự do) và thời gian sống đủ dài (cỡ 270ps ở trạng thái cân bằng), hệ exciton-polariton hứa hẹn có thể quan sát được trạng thái BEC ở nhiệt độ phòng (Eastham và Littlewood, 2001). Ngưng tụ BEC của exciton-polariton trong vi hốc bán dẫn GaAs được quan sát lần đầu tiên trong thực nghiệm vào năm 2002 bởi nhóm của Hui Deng và các cộng sự, đánh dấu bước ngoặt quan trọng về mặt nghiên cứu thực nghiệm exciton-polariton (Deng và nnk, 2002). Và cho đến nay đã có rất nhiều những quan sát thực nghiệm khác khẳng định sự tồn tại của trạng thái ngưng tụ exciton-polariton trong các vi hốc bán dẫn (Deng và nnk, 2003; Bloch và nnk, 2005; Richard và nnk, 2005; Kasprzak và nnk, 2006; Fei và nnk, 2016; Schofield và nnk, 2023). Với tiềm năng ứng dụng trong công nghệ hiện đại, việc tìm hiểu các yếu tố ảnh hưởng tới sự hình thành trạng thái BEC của exciton-polariton trong các vi hốc bán dẫn đang được các nhà khoa học rất quan tâm nghiên cứu trong cả lý thuyết và thực nghiệm. Một trong những yếu tố có ảnh hưởng tới sự hình thành trạng thái BEC của exciton-polariton là cường độ tương tác điện tử - photon. Tương tác này không chỉ ảnh hưởng đến sự hình thành trạng thái ngưng tụ exciton-polariton mà còn đóng vai trò quan trọng trong việc xác định các tính chất ngưng tụ của hệ.

Nghiên cứu này sẽ tập trung khảo sát ảnh hưởng của tương tác điện tử-photon đến quá trình hình thành trạng thái ngưng tụ exciton-polariton trong vi hốc bán dẫn. Phần tiếp theo sẽ sử dụng gần đúng trường trung bình cho mô hình hai mức năng lượng để xác định các tham số trật tự đặc trưng cho trạng thái ngưng tụ exciton-polariton của hệ. Phần 3 trình bày chi tiết các kết quả tính số và phân tích sâu hơn về vấn đề đặt ra. Cuối cùng, bài báo sẽ đưa ra kết luận tổng quát dựa trên các kết quả nghiên cứu đã trình bày.

2. Mô hình và tính toán lý thuyết

*Tác giả liên hệ

Email: dothihonghai@humg.edu.vn

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^e e_{\mathbf{k}}^\dagger e_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^h h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \psi_{\mathbf{q}}^\dagger \psi_{\mathbf{q}} - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_1}^\dagger e_{\mathbf{k}_1} h_{-\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}^\dagger h_{\mathbf{k}_2} - \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}}^\dagger \psi_{\mathbf{q}} + H.c) \quad (1)$$

trong đó ba số hạng đầu mô tả hệ điện tử trên dải dẫn, lỗ trống trên dải hóa trị và photon không tương tác, với $e_{\mathbf{k}}^\dagger (e_{\mathbf{k}})$, $h_{\mathbf{k}}^\dagger (h_{\mathbf{k}})$ và $\psi_{\mathbf{q}}^\dagger (\psi_{\mathbf{q}})$ biểu diễn toán tử sinh (hủy) của điện tử, lỗ trống mang xung lượng \mathbf{k} và photon mang xung lượng \mathbf{q} . Các hệ thức tán sắc của điện tử ($\varepsilon_{\mathbf{k}}^e$) và lỗ trống ($\varepsilon_{\mathbf{k}}^h$) được cho bởi biểu thức:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{e/h} = -2t^{e/h} (\cos k_x + \cos k_y) + \frac{E_g + 8t^{e/h} - \mu}{2} \quad (2)$$

với $t^{e/h}$ là tích phân nhảy nút của điện tử và lỗ trống. Sự khác nhau của tích phân nhảy nút biểu thị mối tương quan về khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống. E_g là khe năng lượng thể hiện sự phân tách giữa đáy của dải dẫn và đỉnh của dải hóa trị. Trong bài báo này chúng tôi xét hệ trong vi hóc bán dẫn do đó $E_g > 0$; μ là thế hóa học. Đối với photon, hệ thức tán sắc $\omega_{\mathbf{q}}$ được cho bởi biểu thức:

$$\omega_{\mathbf{q}} = \sqrt{(c\mathbf{q})^2 + \omega_c^2} - \mu \quad (3)$$

với ω_c là năng lượng của photon tại xung lượng $\mathbf{q} = 0$.

Số hạng thứ tư trong phương trình (1) mô tả tương tác tĩnh điện của điện tử trên dải dẫn với lỗ trống trên dải hóa trị với cường độ thế tương tác Coulomb U . Số hạng cuối cùng trong phương trình (1) mô tả tương tác của hệ điện tử, lỗ trống với photon với cường độ tương tác g . N là số nút mạng trong giếng lượng tử. Ở đây lưu ý rằng ảnh hưởng photon lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ exciton-polariton phụ thuộc vào sự chồng chập của năng lượng kích thích cặp điện tử - lỗ trống với dải năng lượng của photon. Do đó, để khảo sát hệ một cách thuận lợi chúng tôi đưa vào tham số điều chỉnh $d = \omega_c - E_g$. Nếu d nhỏ thì năng lượng kích thích của cặp điện tử - lỗ trống gần với đáy của dải năng lượng photon do đó đóng góp của photon đóng vai trò quan trọng. Trong trường hợp ngược lại, nếu d lớn thì sự đóng góp của photon lên trạng thái ngưng tụ exciton-polariton là ít quan trọng.

Các toán tử tương tác trong phương trình (1) được viết lại bằng phép gần đúng Hartree-Fock, sau khi bỏ qua những hằng số xuất hiện trong phương trình, chúng tôi thu được Hamiltonian Hartree-Fock như sau:

$$H_{UHF} = \sum_{\mathbf{k}} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^e e_{\mathbf{k}}^\dagger e_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^h h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}} + \Delta \sum_{\mathbf{k}} (e_{\mathbf{k}}^\dagger h_{-\mathbf{k}}^\dagger + H.c) + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \psi_{\mathbf{q}}^\dagger \psi_{\mathbf{q}} + (\sqrt{N}\Gamma \psi_0^\dagger + H.c) \quad (4)$$

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

$$\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^e = \varepsilon_{\mathbf{k}}^e - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle h_{\mathbf{q}}^\dagger h_{\mathbf{q}} \rangle \quad (5)$$

$$\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^h = \varepsilon_{\mathbf{k}}^h - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle e_{\mathbf{q}}^\dagger e_{\mathbf{q}} \rangle \quad (6)$$

Trong phương trình (4), Δ và Γ được xác định bởi:

$$\Delta = -\frac{g}{\sqrt{N}} \langle \psi_0 \rangle - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} \quad (7)$$

$$\Gamma = -\frac{g}{N} \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} \quad (8)$$

với $d_{\mathbf{k}} = \langle e_{\mathbf{k}}^\dagger h_{-\mathbf{k}}^\dagger \rangle = \langle h_{-\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}} \rangle = d_{\mathbf{k}}^*$ là mật độ cặp điện tử - lỗ trống, $\langle \psi_0 \rangle$ là độ phân cực của photon tại xung lượng không. Các đại lượng trên đóng vai trò như những tham số trật tự mô tả trạng thái ngưng tụ của hệ. Tùy

thuộc vào sự cạnh tranh giữa tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton $\Delta_{eh} = -\frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}$ và tham số trật tự

trạng thái ngưng tụ photon $\Delta_{ph} = -\frac{g}{\sqrt{N}} \langle \psi_0 \rangle$ mà hệ có thể tồn tại ở trạng thái ngưng tụ exciton, polariton hay photon.

Hamiltonian trong phương trình (4) được chéo hóa bằng phép biến đổi Bogoliubov, các toán tử fermion mới $a_{1k}^\dagger, a_{2k}^\dagger$ và toán tử boson mới b_q^\dagger được định nghĩa:

$$a_{1k}^\dagger = \xi_k e_k^\dagger + \eta_k h_{-k} \quad (9)$$

$$a_{2k}^\dagger = -\eta_k e_k^\dagger + \xi_k h_{-k} \quad (10)$$

$$b_q^\dagger = \psi_q^\dagger + \frac{\sqrt{N}\Gamma}{\omega_{q=0}} \delta_{q,0} \quad (11)$$

trong đó các hệ số ξ_k, η_k thỏa mãn

$$\xi_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{sgn}(\bar{\varepsilon}_k^e + \bar{\varepsilon}_k^h) \frac{(\bar{\varepsilon}_k^e + \bar{\varepsilon}_k^h)}{W_k} \right] \quad (12)$$

$$\eta_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{sgn}(\bar{\varepsilon}_k^e + \bar{\varepsilon}_k^h) \frac{(\bar{\varepsilon}_k^e + \bar{\varepsilon}_k^h)}{W_k} \right] \quad (13)$$

$$W_k = \sqrt{(\bar{\varepsilon}_k^e + \bar{\varepsilon}_k^h)^2 + 4|\Delta|^2} \quad (14)$$

Sau khi chéo hóa hoàn toàn, Hamiltonian trong phương trình (4) có dạng:

$$H_{dia} = \sum_k E_k^1 a_{1k}^\dagger a_{1k} + \sum_k E_k^2 a_{2k}^\dagger a_{2k} + \sum_q \omega_q b_q^\dagger b_q \quad (15)$$

với $E_k^{1,2} = \frac{(\bar{\varepsilon}_k^e - \bar{\varepsilon}_k^h)}{2} \pm \operatorname{sgn}(\bar{\varepsilon}_k^e + \bar{\varepsilon}_k^h) \frac{W_k}{2}$ là các năng lượng giả hạt mới của hệ điện tử - lỗ trống. Từ đó chúng tôi xác định được các giá trị trung bình như sau:

$$\langle e_k^\dagger e_k \rangle = \xi_k^2 f(E_k^1) + \eta_k^2 f(E_k^2) \quad (16)$$

$$\langle h_k^\dagger h_k \rangle = 1 - \eta_k^2 f(E_k^1) - \xi_k^2 f(E_k^2) \quad (17)$$

$$d_k = \langle e_k^\dagger h_{-k}^\dagger \rangle = \frac{\Delta}{W_k} \operatorname{sgn}(\bar{\varepsilon}_k^e + \bar{\varepsilon}_k^h) [f(E_k^1) - f(E_k^2)] \quad (18)$$

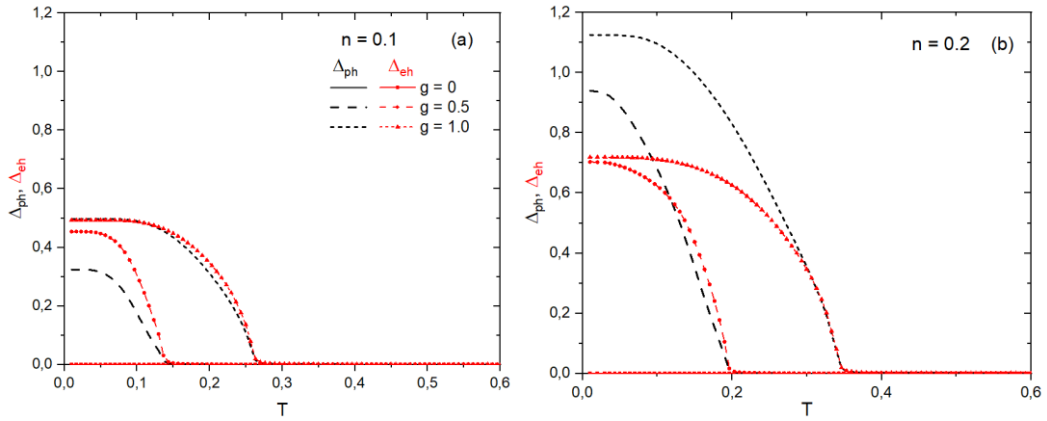
$$\langle \psi_{q=0} \rangle = -\frac{\sqrt{N}\Gamma}{\omega_{q=0}} \quad (19)$$

Giải tự hợp các phương trình (5) – (8) và (16) – (19) chúng tôi xác định được các tham số trật tự mô tả trạng thái ngưng tụ của hệ exciton, polariton, và photon trong vi hốc bán dẫn. Khảo sát sự phụ thuộc xung lượng của mật độ exciton sẽ giúp chúng ta thấy rõ bản chất trạng thái ngưng tụ của hệ.

3. Kết quả và thảo luận

Phần này biểu thị các giản đồ mô tả các trạng thái ngưng tụ của hệ exciton, polariton và photon trong vi hốc bán dẫn, các kết quả tính số được chúng tôi thực hiện cho hệ hai chiều gồm $N = 200 \times 200$ nút mạng và chọn $t^e = 1$ là đơn vị của năng lượng. Khi đó tất cả các đại lượng đều được xác định với đơn vị t^e . Không mất tính tổng quát, chúng tôi cố định năng lượng của photon tại xung lượng không $\omega_c = 0.5$ và lựa chọn $U = 2.0$, tham số điều chỉnh $d = -1$ và tích phân nhảy nút của lỗ trống $t^h = 0.15$ để phù hợp với hệ exciton-polariton trong vi hốc bán dẫn GaAs.

Trước tiên chúng tôi khảo sát tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton (Δ_{eh}) và tham số trật tự trạng thái ngưng tụ photon (Δ_{ph}) theo nhiệt độ khi thay đổi cường độ tương tác điện tử - photon và tổng mật độ trạng thái kích thích của hệ $n = \frac{1}{N} \sum_q \langle \psi_q^\dagger \psi_q \rangle + \frac{1}{2N} \sum_k (\langle e_k^\dagger e_k \rangle + \langle h_k^\dagger h_k \rangle)$.

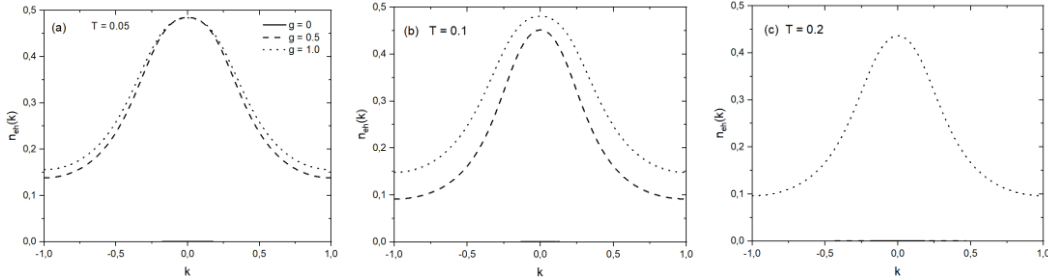


Hình 1. Tham số trật tự trạng thái ngưng tụ cặp điện tử - lỗ trống Δ_{eh} và photon Δ_{ph} theo nhiệt độ ứng với các giá trị khác nhau của cường độ tương tác điện tử - photon g khi $n = 0.1$ (hình a) và $n = 0.2$ (hình b)

Từ kết quả trên giản đồ ở Hình 1 ta nhận thấy, khi không có tương tác điện tử - photon, các giá trị Δ_{eh} và Δ_{ph} đều nhỏ không đáng kể thể hiện hệ ở trạng thái không trật tự. Với một giá trị xác định khác không của hằng số tương tác g , cả tham số trật tự exciton Δ_{eh} và photon Δ_{ph} đều khác không ở nhiệt độ đủ thấp thể hiện hệ ở trạng thái ngưng tụ exciton-polariton. Khi tăng nhiệt độ, tăng giáng nhiệt lớn làm phá vỡ phần nào các trạng thái liên kết nên trạng thái ngưng tụ bị suy yếu. Điều này được thể hiện ở sự giảm nhanh giá trị của Δ_{eh} và Δ_{ph} , chúng đều bằng không tại cùng một giá trị nhiệt độ tới hạn T_c . T_c được gọi là nhiệt độ chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton-polariton. Trên nhiệt độ tới hạn T_c , mọi trạng thái liên kết exciton đều bị phá hủy và hệ ở trong trạng thái plasma của điện tử, lỗ trống và photon. Tăng hằng số tương tác g hay mật độ kích thích n , nhiệt độ tới hạn T_c tăng lên và giá trị của tham số trật tự cũng tăng thể hiện sự ổn định của các trạng thái ngưng tụ. Trên Hình 1a, khi mật độ kích thích nhỏ ($n = 0.1$), tại giá trị $g = 0.5$, giá trị của Δ_{eh} lớn hơn giá trị của Δ_{ph} thể hiện hệ ưu tiên ở trạng thái ngưng tụ exciton. Thật vậy, với mật độ kích thích nhỏ, giá trị của thể hóa cách xa đáy của dải photon nên đóng góp của photon nhỏ dẫn đến tham số trật tự trạng thái ngưng tụ photon nhỏ trong khi tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton lớn. Hệ khi đó ổn định ở trạng thái ngưng tụ exciton-polariton. Tăng hằng số tương tác điện tử - photon lên $g = 1.0$, giá trị của tham số trật tự Δ_{eh} và Δ_{ph} tương đương nhau. Khi tăng mật độ kích lên $n = 0.2$, Hình 1b cho thấy giá trị của Δ_{ph} lớn hơn giá trị của Δ_{eh} . Thật vậy, tăng mật độ kích thích làm tăng sự xen phủ giữa dải hóa trị và dải dẫn giúp tăng khả năng ghép cặp điện tử - lỗ trống, đồng thời giá trị của thể hóa tiến gần tới đáy của dải photon làm tăng cường sự đóng góp của photon. Do đó giá trị của cả hai tham số trật tự trạng thái ngưng tụ Δ_{eh} và Δ_{ph} đều tăng lên. Khi đóng góp của photon trở nên quan trọng và có thêm đóng góp của tương tác điện tử - photon g thì tham số trật tự trạng thái ngưng tụ photon Δ_{ph} tăng nhanh và lớn hơn tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton Δ_{eh} . Tại nhiệt độ thấp, tham số trật tự trạng thái ngưng tụ photon chiếm ưu thế hơn.

Như vậy, cả cường độ tương tác điện tử - photon và mật độ kích thích đều có vai trò quan trọng trong việc thiết lập trạng thái ngưng tụ và tính chất của trạng thái exciton-polariton. Để thấy rõ hơn ảnh hưởng của cường độ tương tác điện tử - photon và nhiệt độ lên bản chất trạng thái ngưng tụ, trong Hình 2 chúng tôi khảo sát sự phụ thuộc vào xung lượng của tham số trật tự $n_{eh}(\mathbf{k}) = \langle e_k^\dagger n_{\mathbf{k}} \rangle = d_k$ khi $n = 0.1$ ở một vài giá trị nhiệt độ khác nhau. Đại lượng này biểu thị sự kết hợp trong không gian xung lượng của điện tử và lỗ trống trong việc hình thành trạng thái exciton và polariton trong hệ. Hình 2 cho thấy trong mọi trường hợp $n_{eh}(\mathbf{k})$ đều đạt cực đại tại xung lượng $\mathbf{k} = 0$ thể hiện polariton ngưng tụ trong trạng thái BEC. Tại mọi giá trị nhiệt độ, khi $g = 0$ mật độ cặp điện tử - lỗ trống có giá trị rất nhỏ trong toàn bộ không gian xung lượng. Điều này cũng được thể hiện rất rõ trong Hình 1 bởi giá trị của cả hai tham số trật tự trạng thái ngưng tụ đều xấp xỉ bằng không. Tăng hằng số tương tác điện tử - photon làm mật độ exciton $n_{eh}(\mathbf{k})$ tăng do đó cả hai tham số trật tự trạng thái ngưng tụ đều tăng (xem Hình 1a). So sánh Hình 2a, b, c ta thấy, khi tăng nhiệt độ, năng lượng nhiệt tăng lên làm phá vỡ sự kết cặp điện tử - lỗ trống nên mật độ $n_{eh}(\mathbf{k})$ bị suy yếu. Hình 2c cho thấy, với $T = 0.2$, chỉ khi $g = 1.0$, mật

độ cặp điện tử - lỗ trống $n_{eh}(\mathbf{k})$ mới khác không, còn khi $g = 0$ và $g = 0.5$ thì $n_{eh}(\mathbf{k})$ hoàn toàn bị triệt tiêu. Điều này hoàn toàn phù hợp với kết quả biểu thị ở Hình 1a, do $T = 0.2$ lớn hơn giá trị T_c của hệ khi $g = 0$ và $g = 0.5$. Ở trên nhiệt độ tới hạn, do năng lượng nhiệt quá lớn, các trạng thái liên kết trong hệ bị phá vỡ hoàn toàn, hệ tồn tại trong trạng thái plasma của điện tử, lỗ trống và photon.



Hình 2. Mật độ exciton $n_{eh}(\mathbf{k})$ theo xung lượng \mathbf{k} ứng với một vài giá trị của cường độ tương tác điện tử - photon g tại $n = 0.1$ và nhiệt độ $T = 0.05$ (a), $T = 0.1$ (b) và $T = 0.2$ (c)

4. Kết luận

Như vậy, bằng việc áp dụng gần đúng Hartree-Fock, chúng tôi đã tìm thấy các phương trình tự hợp xác định các tham số mô tả trạng thái ngưng tụ của hệ điện tử, lỗ trống và photon trong cấu trúc vi hốc. Kết quả tính toán cho thấy tương tác điện tử-photon và mật độ kích thích ảnh hưởng trực tiếp đến sự hình thành trạng thái ngưng tụ exciton-polariton. Ở mật độ kích thích thấp với tương tác điện tử - photon yếu, các exciton đóng vai trò chính trong việc hình thành trạng thái ngưng tụ, hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ exciton-polariton. Tuy nhiên, khi mật độ kích thích lớn với tương tác điện tử - photon mạnh, photon đóng vai trò quan trọng hơn, thể hiện hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ polariton.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 103.01-2023.43.

Tài liệu tham khảo

- C. Weisbuch, N. Nishioka, A. Ishikawa, Y. Arakawa, 1992, Observation of the coupled exciton-photon mode splitting in a semiconductor quantum microcavity, *Phys. Rev. Lett.* 69, 3314–3317.
- Fei, Z. et al. 2016, Nano-optical imaging of WSe2 waveguide modes revealing light-exciton interactions. *Phys. Rev. B* 94, 081402(R).
- J. Bloch, B. Sermage, M. Perrin, P. Snellart, R. Andre, Le Si Dang, 2005, Monitoring the dynamics of a coherent cavity polariton population, *Phys. Rev. B* 71, 155311.
- J. Kasprzak, M. Richard, S. Kundermann, A. Baas, P. Jeanbrum, J.M. Keeling, F.M. Marchetti, M.H. Szymanska, R. Andre, J.L. Staehli, V. Savona, P.B. Littlewood, B. Devaud, Le Si Dang, 2006, Bose-Einstein condensation of exciton polaritons, *Nature* 443, 409.
- H. Deng, G. Weihs, C. Santori, J. Bloch, and Y. Yamamoto, 2002, Condensation of Semiconductor Microcavity Exciton Polaritons, *Science* 298, 199.
- H. Deng, G. Weihs, D. Snoke, J. Bloch, and Y. Yamamoto, 2003, Polariton lasing vs. photon lasing in a semiconductor microcavity, *Pro. Nat. A ad. of Sciences (USA)* 100, 15318.
- M. Richard, J. Kasprzak, R. Romestain, R. Andre, Le Si Dang, 2005, Spontaneous Coherent Phase Transition of Polaritons in CdTe Microcavities, *Phys. Rev. Lett.* 94, 187401.
- P. R. Eastham and P. B. Littlewood, 2001, Bose condensation of cavity polaritons beyond the linear regime: The thermal equilibrium of a model microcavity, *Phys. Rev. B.* 64, 235101.
- Ross C. Schofield, et al., 2023, Bose-Einstein Condensation of Light in a Semiconductor Quantum Well Microcavity, *arXiv:2306.15314v1* [physics.optics].

ABSTRACT

The influence of electron - photon interaction on the exciton-polariton condensations in semiconductor microcavity

Nguyen Thi Hau^{1,2}, Do Thi Hong Hai^{1,*}, Phan Van Nham³

¹*Hanoi University of Mining and Geology*

²*Graduate University of Science and Technology, Vietnam Academy of Science and Technology*

³*Faculty of Natural Sciences, Duy Tan University*

In this paper, we investigate the impact of electron-photon interaction on exciton-polariton condensation in semiconductor microcavity. Applying the Hartree-Fock approximation to a 2D model of electrons, holes, and photons in a microcavity structure, a set of self-consistent equations determining the excitonic, polaritonic and photonic condensate order parameters was found. Our numerical results show that the existence of the exciton-polariton condensation state at sufficiently low temperatures when electron-photon interactions are present. Furthermore, the phase transition temperature increases as the excitation density and electron-photon interaction increase.

Keywords: Exciton; Polariton; Bose-Einstein condensation; semiconductor microcavity, electron - photon interaction