

# Giản đồ pha trạng thái điện môi exciton do mất cân bằng khối lượng

## Phase diagrams of the excitonic insulator due to the mass imbalance

Đỗ Thị Hồng Hải<sup>a</sup>, Phan Văn Nhâm<sup>b\*</sup>  
Do Thi Hong Hai<sup>a</sup>, Phan Van Nham<sup>b\*</sup>

<sup>a</sup>Trường Đại học Mỏ - Địa chất, 18 phố Viên, Đức Thắng, Bắc Từ Liêm, Hà Nội, Việt Nam

<sup>a</sup>Hanoi University of Mining and Geology, 18 Vien street, Duc Thang, Bac Tu Liem, Hanoi, Vietnam

<sup>b</sup>Viện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ Cao, Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam

<sup>b</sup>Institute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Vietnam

(Ngày nhận bài: 31/10/2023, ngày phản biện xong: 30/11/2023, ngày chấp nhận đăng: 20/02/2024)

### Tóm tắt

Sự đồng tồn tại trạng thái điện môi exciton (EI) cùng các trạng thái khác trong hệ do sự mất cân bằng khối lượng của điện tử và lỗ trống trong mô hình Falicov-Kimball mở rộng có tương tác điện tử - phonon được khảo sát. Bằng việc áp dụng phương pháp gần đúng Hartree-Fock không giới hạn, chúng tôi thu được hệ phương trình tự hợp, xác định tham số trật tự trạng thái EI. Kết quả tính số cho thấy, khi nhiệt độ thấp, hệ tồn tại trạng thái EI chỉ khi mất cân bằng khối lượng đủ nhỏ, đặc biệt khi sự khác nhau giữa năng lượng tại nút của điện tử và lỗ trống không nhiều. Giao nhau các trạng thái BCS-BEC của trạng thái EI cũng được thảo luận, khẳng định vai trò rất lớn của mất cân bằng khối lượng lên cấu trúc của trạng thái EI.

*Từ khóa:* Điện môi exciton; mô hình Falicov-Kimball mở rộng; tương tác điện tử - phonon; mất cân bằng khối lượng.

### Abstract

The interplay among the excitonic insulator (EI) state and other instabilities in the impact of the mass imbalance between electrons and holes in the extended Falicov-Kimball model involving the electron-phonon interaction is examined. By using the unrestricted Hartree-Fock approximation, we find a set of self-consistent equations determining the EI order parameter. Its numerical results release a stability of EI state at low temperatures only if the mass imbalance is sufficiently low, especially, in the case of small difference onsite energies of electrons and holes. BCS-BEC crossover of the EI state is also addressed, revealing the impression of the mass imbalance in the structure of the EI state in the system.

*Keywords:* The excitonic insulator; the extended Falicov-Kimball model; the electron-phonon interaction; the mass imbalance.

### 1. Đặt vấn đề

Chuyển pha trong các hệ điện tử tương quan như chuyển pha trật tự từ, trật tự điện, siêu dẫn hay chuyển pha kim loại - điện môi,... đã và đang thu hút được sự quan tâm nghiên cứu của

nhiều nhà vật lý lý thuyết cả ở trong nước và trên thế giới. Hệ exciton được xem là hệ điện tử tương quan và quá trình chuyển pha trạng thái ngưng tụ của hệ exciton cũng đã được nghiên cứu từ những năm 60 của thế kỷ trước [1,2]. Do

\*Tác giả liên hệ: Phan Văn Nhâm

Email: phanvannham@duytan.edu.vn

là trạng thái kết cặp của điện tử và lỗ trống nên exciton trung hòa về điện và vì vậy trạng thái ngưng tụ của exciton còn được gọi là điện môi exciton (Exciton insulator - EI). Tuy nhiên, do thời gian sống ngắn nên những quan sát thực nghiệm về trạng thái này vẫn còn hạn chế và bản chất của trạng thái ngưng tụ vẫn còn chưa sáng tỏ.

Mặc dù việc quan sát thực nghiệm trạng thái EI gặp nhiều khó khăn nhưng cho đến nay đã có rất nhiều khẳng định về sự tồn tại của trạng thái EI trên một số vật liệu, chẳng hạn như các kim loại chuyển tiếp (TMDs) [3, 4], giếng lượng tử kép (DQW) [5], hay trong các hệ graphene (DBG, DLG) [6, 7]. Đặc biệt, gần đây người ta đã đo được nhiệt độ tới hạn của ngưng tụ exciton trên vật liệu Ta<sub>2</sub>NiSe<sub>5</sub> đạt tới 326 K [8]. Trên các hệ vật liệu này, nói chung mối tương quan giữa khối lượng của điện tử và lỗ trống là không giống nhau. Chẳng hạn như, trong TMDs hay DQW, khối lượng của lỗ trống thường lớn hơn khối lượng của điện tử còn trong các hệ graphene, khối lượng của điện tử và lỗ trống gần như bằng nhau [9]. Trong các hệ fermion mất cân bằng về khối lượng, thường sẽ xuất hiện các trạng thái lượng tử với nhiều tính chất kỳ lạ. Chính vì vậy, việc khảo sát ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng lên trạng thái EI trong các hệ này là cần thiết.

Trong nghiên cứu lý thuyết ngưng tụ exciton, mô hình thường được sử dụng rộng rãi nhất là mô hình Falicov-Kimball. Đây là mô hình mô tả tương tác giữa điện tử linh động  $c$  và điện tử định xứ  $f$  bởi tương tác Coulomb [10, 11]. Điều này vẫn đúng đối với mô hình Falicov-Kimball mở rộng (EFK) [12,13], là mô hình có tính tới nhảy nút của điện tử trên mức  $f$  và thừa nhận sự kết cặp của điện tử  $c$  với điện tử  $f$  thông qua tương tác Coulomb. Mỗi cặp điện tử  $c$ - $f$  tương đương với một trạng thái exciton. Ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng lên trạng thái cơ bản của ngưng tụ exciton trong mô hình EFK đã được khảo sát [14,15]. Tuy nhiên, việc nghiên cứu

trạng thái EI thông qua mô hình EFK là hoàn toàn theo cơ chế điện tử, tức là chỉ quan tâm tới tương tác Coulomb giữa điện tử và lỗ trống. Trong khi đó, các quan sát thực nghiệm trên một số vật liệu đã khẳng định phonon cũng đóng vai trò quan trọng trong việc hỗ trợ sự kết cặp điện tử - lỗ trống hình thành exciton và trạng thái ngưng tụ [16-18]. Do đó, các dấu hiệu của ngưng tụ exciton khi xem xét trong mô hình EFK chưa được phù hợp thực tế.

Trong bài báo này, để có thể nhận được các dấu hiệu ngưng tụ exciton một cách thực tế nhất, chúng tôi sử dụng mô hình Falicov-Kimball mở rộng có tương tác điện tử - phonon. Trong khuôn khổ gần đúng Hartree-Fock không giới hạn, ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng lên sự hình thành trạng thái EI trong hệ được xem xét. Nhờ phương pháp tính số giải hệ phương trình tự hợp, chúng tôi xác định được các tham số trật tự trạng thái EI. Từ đó, các giản đồ pha mô tả ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng lên chuyển pha trạng thái EI trong hệ được thiết lập.

Ngoài phần Mở đầu và Kết luận thì bài báo được chia thành 2 phần. Trong đó, Hamiltonian của mô hình và các tính toán giải tích áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn được chúng tôi trình bày trong phần 2. Từ các kết quả giải tích, chúng tôi thiết lập chương trình tính số và trình bày các kết quả nhận được cùng thảo luận trong phần 3.

## 2. Mô hình và tính toán giải tích

Mô hình Falicov-Kimball mở rộng có tương tác điện tử - phonon được mô tả bởi Hamiltonian viết trong không gian xung lượng dưới dạng sau

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

trong đó, số hạng thứ nhất mô tả phần không tương tác của hệ điện tử - phonon

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}}^{\phi} \phi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \phi_{\mathbf{k}} + \omega_0 b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}}) \quad (2)$$

với  $\phi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(\phi_{\mathbf{k}})$  là các toán tử sinh (hủy) của điện tử  $c$  trên dải dẫn (với  $\phi = c$ ), điện tử  $f$  trên dải hóa trị (với  $\phi = f$ ) và  $b_{\mathbf{k}}^{\dagger}(b_{\mathbf{k}})$  là toán tử sinh (hủy) của phonon mang xung lượng  $\mathbf{k}$  với năng lượng không tán sắc  $\omega_0$ . Trong mô hình liên kết chặt, năng lượng tán sắc của các điện tử được cho bởi

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{\phi} = \epsilon^{\phi} - t^{\phi} \gamma_{\mathbf{k}} - \mu \quad (3)$$

với  $\epsilon^{\phi}$  và  $t^{\phi}$  lần lượt là năng lượng tại nút và tích phân nhảy nút của điện tử và  $\mu$  là thế hóa học. Để biểu thị mối tương quan về khối lượng của các điện tử và lỗ trống, tích phân nhảy nút của điện tử  $f$  trên dải hóa trị thường được chọn

$$\mathcal{H}_{int} = \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} + \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} [c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} (b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + b_{\mathbf{q}}) + f_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} + b_{-\mathbf{q}})] \quad (4)$$

với  $U$  là cường độ thế tương tác Coulomb và  $g$  là hằng số tương tác điện tử - phonon.

Bỏ qua thăng giáng trong gần đúng Hartree-Fock không giới hạn, ta nhận được Hamiltonian mới gồm hai phần là phần điện tử và phần phonon. Để tính các giá trị kì vọng thì Hamiltonian cần được chéo hóa hoàn toàn, tức là được viết dưới dạng toàn phương của các toán tử sinh và hủy. Do đó, chúng ta sử dụng phép biến đổi Bogoliubov định nghĩa các toán tử giả hạt fermion mới để chéo hóa phần điện tử

nhỏ hơn tích phân nhảy nút của điện tử  $c$  trên dải dẫn thể hiện dải hóa trị hẹp hơn dải dẫn. Chẳng hạn như, trong tính toán số với hệ exciton trực tiếp trong kim loại chuyển tiếp, người ta thường lựa chọn  $t^f = -0.3t^c$  [19,20] hay trong graphene, người ta thường lấy  $t^f = -t^c$  [21]. Trong mạng tinh thể hai chiều hình vuông với  $N$  nút mạng và hằng số mạng  $a = 1$  thì  $\gamma_{\mathbf{k}} = 2(\cos k_x + \cos k_y)$ .

Số hạng thứ hai  $\mathcal{H}_{int}$  trong Hamiltonian (1) mô tả phân tương tác Coulomb giữa các điện tử  $c - f$  và tương tác điện tử - phonon

$$\begin{aligned} C_{1\mathbf{k}}^{\dagger} &= u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ C_{2\mathbf{k}}^{\dagger} &= -v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{aligned} \quad (5)$$

với  $u_{\mathbf{k}}$  và  $v_{\mathbf{k}}$  được chọn sao cho  $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ . Trong khi đó, phần phonon được chéo hóa bằng việc định nghĩa toán tử phonon mới

$$B_{\mathbf{q}}^{\dagger} = b_{\mathbf{q}}^{\dagger} + \sqrt{N} \frac{\eta}{\omega_0} \quad (6)$$

Cuối cùng, Hamiltonian chéo hóa hoàn toàn trong gần đúng Hartree-Fock không giới hạn nhận được dưới dạng sau

$$\mathcal{H}_{HFU} = \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}}^1 C_{1\mathbf{k}}^{\dagger} C_{1\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}^2 C_{2\mathbf{k}}^{\dagger} C_{2\mathbf{k}}) + \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} B_{\mathbf{q}}^{\dagger} B_{\mathbf{q}} \quad (7)$$

trong đó

$$E_{\mathbf{k}}^{1(2)} = \frac{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c}{2} \mp \frac{\text{sgn}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c)}{2} \Gamma_{\mathbf{k}} \quad (8)$$

là các năng lượng giả hạt tái chuẩn hóa với  $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{\phi}$  là năng lượng tán sắc tái chuẩn hóa của các điện tử  $c$  ( $f$ ) được cho bởi

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{c(f)} = \epsilon_{\mathbf{k}}^{c(f)} + U n^{f(c)} \quad (9)$$

ở đây,  $n^{\phi} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \phi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \phi_{\mathbf{k}} \rangle$  là mật độ điện tử và

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c)^2 + 4|\delta|^2} \quad (10)$$

$$\delta = -\frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{g}{\sqrt{N}} \langle b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + b_{-\mathbf{q}} \rangle \quad (11)$$

trong đó  $\delta$  có chứa đại lượng  $n_{\mathbf{k}} = \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle$  biểu thị sự lai hóa giữa các điện tử  $c$  và điện tử  $f$  nên được gọi là tham số trật tự trạng thái EI.

$$n_{\mathbf{k}} = \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle = -[n^F(E_{\mathbf{k}}^1) - n^F(E_{\mathbf{k}}^2)] \text{sgn}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c) \frac{\delta}{\Gamma_{\mathbf{k}}} \quad (12)$$

trong đó  $n^F(\epsilon) = (1 + e^{\epsilon\beta})^{-1}$  là hàm phân bố Fermi-Dirac với  $\beta$  là nghịch đảo của nhiệt độ tuyệt đối,  $\beta = 1/T$ .

Trong bài báo này, các giản đồ pha trạng thái EI được thiết lập thông qua khảo sát tính chất của các tham số trật tự  $\delta$  và  $n_{\mathbf{k}}$ . Khi tham số trật tự khác không, thể hiện sự lai hóa mạnh giữa các điện tử  $c - f$  và do đó có thể khẳng định hệ tồn tại trong trạng thái EI.

### 3. Kết quả tính số và thảo luận

Trong phần này, chúng tôi trình bày các kết quả tính số để thảo luận ảnh hưởng của mật cân bằng khối lượng và nhiệt độ lên trạng thái EI trong hệ. Các kết quả tính số của chúng tôi nhận được từ chương trình tính số giải tự hợp các phương trình (9)-(12) trong hệ hai chiều gồm  $N = 200 \times 200$  nút mạng để tìm tham số trật tự trạng thái EI. Ở đây, chúng tôi chọn  $t^c = 1$  là đơn vị của năng lượng và cố định  $\omega_0 = 2.0$  và  $\epsilon^c = 0$ . Với sự lựa chọn  $\epsilon^c = 0$  thì năng lượng tại nút  $\epsilon^f$  của điện tử  $f$  thể hiện mức độ xen phủ giữa hai dải năng lượng. Trong các nghiên cứu trước đó, chúng tôi đã khẳng định exciton trong hệ ngưng tụ khi tương tác điện tử - phonon đủ lớn và vì vậy, trong nghiên cứu này, chúng tôi cố định hằng số tương tác điện tử - phonon  $g = 0.6$ . Chúng tôi cũng lựa chọn giá trị của tích phân nhảy nút của điện tử  $f$  sao cho  $|t^f| < 1$  thể hiện dải hóa trị hẹp hơn dải dẫn hay điện tử  $f$  định xứ hơn. Do sự lựa chọn  $t^c = 1$  nên sự mất cân bằng khối lượng của các điện tử  $c$  và điện tử  $f$  trong hệ được thể hiện bởi giá trị của  $|t^f|$ .

Để có một bức tranh toàn diện về sự hình thành trạng thái EI ảnh hưởng bởi mật cân bằng khối lượng, chúng tôi thiết lập các giản đồ pha mô tả chuyển pha trạng thái EI theo các thông số

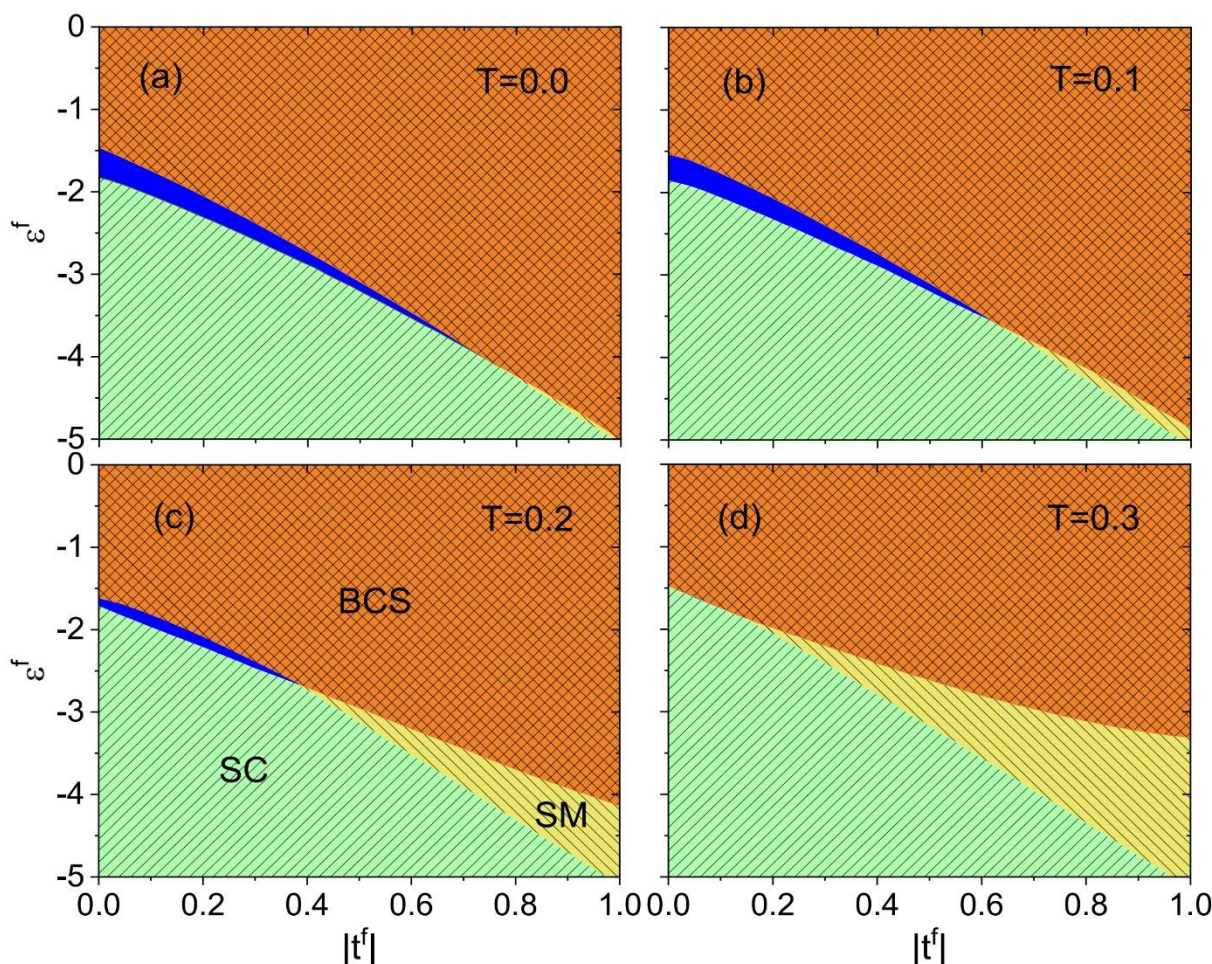
Từ Hamiltonian trong phương trình (7) chúng ta xác định được giá trị kỳ vọng mà cũng được xem là tham số trật tự trạng thái EI

của mô hình. Trước hết, chúng tôi thiết lập giản đồ pha mô tả chuyển pha trạng thái EI trong mặt phẳng  $(|t^f|, \epsilon^f)$  ứng với một vài giá trị của nhiệt độ  $T$  khi  $U = 3.0$ . Để có được giản đồ pha, chúng tôi xác định giá trị tới hạn của tích phân nhảy nút  $|t^f|$  của điện tử  $f$  ứng với mỗi giá trị của năng lượng tại nút  $\epsilon^f$  của điện tử  $f$  mà tại đó tham số trật tự  $\delta$  khác không. Ở đây, chúng tôi còn xác định giao nhau BCS-BEC của các dạng ngưng tụ BCS-tương tự như trạng thái ngưng tụ của các cặp Cooper trong lý thuyết BCS (John Bardeen, Leon Cooper và Robert Schrieffer) và dạng ngưng tụ BEC (Bose-Einstein condensation) của các hạt boson. Ranh giới pha ngưng tụ exciton trong giới hạn tương tác yếu và giới hạn tương tác mạnh được xác định tại các vị trí mà tại đó giá trị tham số trật tự  $n_{\mathbf{k}} = \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle$  đạt cực đại tại xung lượng  $\mathbf{k} = 0$ . Khi hệ trong pha bán kim loại, dải hóa trị và dải dẫn xen phủ nhau, mặt Fermi rộng và do đó sự lai hóa của các điện tử và lỗ trống gần mặt Fermi được thiết lập. Pha EI được hình thành bởi sự ngưng tụ của các cặp điện tử và lỗ trống trong dạng BCS (vùng kẻ caro). Trong trường hợp này, tham số trật tự  $n_{\mathbf{k}}$  có giá trị cực đại tại các xung lượng gần xung lượng Fermi, thể hiện chỉ những điện tử và lỗ trống gần mặt Fermi mới tham gia kết cặp và hình thành trạng thái ngưng tụ. Ngược lại, trong pha bán dẫn, các dải  $c - f$  tách xa nhau, mặt Fermi co lại thành một điểm và một số lượng lớn các exciton được hình thành và ngưng tụ trong trạng thái BEC (vùng màu xanh) với tham số trật tự  $n_{\mathbf{k}}$  có cực đại tại xung lượng  $\mathbf{k} = 0$ . Do đó, chúng tôi xác định ranh giới giao nhau BCS-BEC của các trạng thái ngưng tụ exciton tại các vị trí này. Giản đồ pha ở Hình 1 cho thấy tại nhiệt độ thấp, với mỗi giá trị xác



định của  $\epsilon^f$  đủ lớn, khi tăng  $|t^f|$ , hệ chuyển từ pha bán dẫn (vùng gạch chéo lên) sang trạng thái EI dạng BEC tại một giá trị tới hạn của  $|t^f|$ . Tiếp tục tăng  $|t^f|$ , trạng thái EI dạng BCS được thiết lập và trong trường hợp này ngưng tụ dạng BCS chiếm ưu thế. Vùng bán kim loại (vùng gạch chéo xuống) được mở rộng hay vùng ngưng tụ exciton bị thu hẹp lại khi giảm  $\epsilon^f$ ,  $|t^f|$  phải rất lớn mới có thể thiết lập trạng thái EI. Khi tăng nhiệt độ, năng lượng nhiệt lớn phá hủy trạng thái liên kết của điện tử - lỗ trống hình thành exciton nên trạng thái ngưng tụ exciton cả dạng BCS và dạng BEC đều bị thu hẹp lại,  $\epsilon^f$  đủ lớn và  $|t^f|$  phải rất lớn hay mất cân bằng khối lượng rất thấp mới có thể thiết lập trạng thái EI (xem Hình 1b -

1d). Đặc biệt khi nhiệt độ cao, ví dụ  $T = 0.3$  (Hình 1d), trạng thái EI gần như chỉ ở dạng BCS. Bên cạnh đó, tại một giá trị xác định của  $|t^f|$ , giảm  $\epsilon^f$  làm gia tăng sự phân tách giữa dải dẫn và dải hóa trị làm giảm khả năng ghép cặp điện tử - lỗ trống hình thành exciton. Do đó, khi giảm  $\epsilon^f$ , sự lai hóa giữa điện tử và lỗ trống chỉ xuất hiện ở  $|t^f|$  lớn hơn. Điều này có nghĩa rằng khi  $\epsilon^f$  nhỏ, sự ngưng tụ exciton chỉ có thể được thiết lập ở mất cân bằng khối lượng thấp. Khi giảm  $\epsilon^f$ , giao nhau BCS-BEC giữa các trạng thái ngưng tụ cũng được thiết lập. Vị trí giao nhau BCS-BEC dịch chuyển về vùng giá trị  $\epsilon^f$  nhỏ hơn khi tăng nhiệt độ.



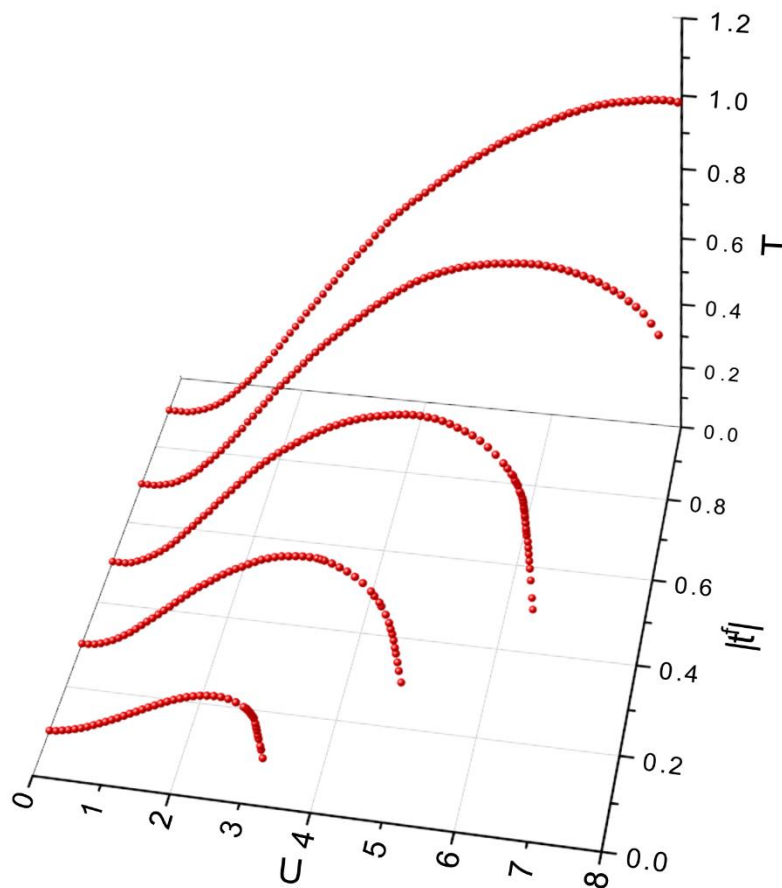
Hình 1. Giản đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton trong mặt phẳng  $(|t^f|, \epsilon^f)$  ở một vài nhiệt độ khác nhau khi  $U = 3.0$

Tiếp theo, để thấy rõ hơn ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng và nhiệt độ lên sự hình thành trạng thái EI trong hệ, chúng tôi biểu thị

trên Hình 2 giản đồ pha trạng thái EI trong mặt phẳng  $(U, T)$  ứng với một vài giá trị của  $|t^f|$  khi năng lượng tại nút  $\epsilon^f = -2.0$ . Hình 2 cho thấy

ứng với một giá trị xác định của tích phân nhảy nút  $|t^f|$ , trạng thái EI chỉ được thiết lập trong một khoảng giữa hai giá trị giới hạn của thế tương tác Coulomb ở nhiệt độ thấp. Khi tích phân nhảy nút  $|t^f|$  được tăng lên hay mất cân bằng khối lượng giữa điện tử và lỗ trống đủ nhỏ thì vùng ngưng tụ được mở rộng. Trong mọi trường hợp, khi nhiệt độ quá cao, năng lượng nhiệt lớn sẽ phá hủy trạng thái liên kết của các điện tử - lỗ trống làm cho trạng thái EI bị suy yếu. Exciton trong hệ khi đó chỉ ngưng tụ khi

mất cân bằng khối lượng rất thấp, hay  $|t^f| \approx 1$ . Khi tăng nhiệt độ tới giá trị cao hơn nhiệt độ tới hạn  $T_c$ , mọi trạng thái liên kết đều bị phá hủy và hệ chuyển sang trạng thái plasma của các điện tử và lỗ trống không liên kết. Các giản đồ này tương tự như các giản đồ đã được trình bày trong các tài liệu [22,23]. Tuy nhiên, trong nghiên cứu này của chúng tôi, ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng lên việc hình thành trạng thái EI đã được khảo sát kỹ lưỡng.



Hình 2. Giản đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton trong mặt phẳng  $(U, T)$  ứng với một vài giá trị của  $|t^f|$  khi  $\epsilon^f = -2.0$ .

#### 4. Kết luận

Trong bài báo này, giản đồ pha trạng thái EI ảnh hưởng bởi mất cân bằng khối lượng đã được chúng tôi thiết lập bằng áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn cho mô hình Falicov-Kimball mở rộng có tương tác điện tử - phonon. Từ các kết quả tính toán giải tích nhận

được, hệ phương trình tự hợp xác định tham số trật tự trạng thái EI được giải số nhờ chương trình chính số viết theo ngôn ngữ lập trình Fortran. Trên cơ sở các kết quả tính số, chúng tôi thiết lập các giản đồ pha trạng thái EI ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng. Các giản đồ pha cho thấy, hệ ổn định trong trạng thái EI ở nhiệt

độ thấp khi mật cân bằng khối lượng đủ nhỏ. Khi năng lượng tại nút của điện tử  $f$  nhỏ hay hai dải năng lượng tách xa nhau, sự ngưng tụ exciton chỉ có thể được thiết lập ở mật cân bằng khối lượng rất thấp. Khi giảm năng lượng tại nút của điện tử  $f$ , giao nhau BCS-BEC giữa các trạng thái ngưng tụ được thiết lập và vị trí giao nhau BCS-BEC dịch chuyển về vùng giá trị  $\epsilon^f$  nhỏ hơn khi tăng nhiệt độ. Khi nhiệt độ cao, ngưng tụ exciton chỉ có thể xảy ra ở mật cân bằng khối lượng rất thấp. Những nghiên cứu kỹ lưỡng hơn về bản chất động học của chuyển pha trạng thái EI ảnh hưởng bởi mật cân bằng khối lượng sẽ là những nghiên cứu tiếp theo của chúng tôi trong tương lai.

### Tài liệu tham khảo

- [1] N. F. Mott. (1961). The transition to the metallic state. *Philos. Mag.* 6, 287.
- [2] R. Knox, in: F. Seitz, D. Turnbull (Eds.). (1963). *Solid State Physics*, Academic Press, New York, p. Suppl. 5 p. 100.
- [3] Kogar et. al. (2017). Signatures of exciton condensation in a transition metal dichalcogenide. *Science*. 358. 1314.
- [4] G. Wang, A. Chernikov, M. M. Glazov, T. F. Heinz, X. Marie, T. Amand and B. Urbaszek. (2018). Colloquium: Excitons in atomically thin transition metal dichalcogenides. *Rev. Mod. Phys.* 90, 021001.
- [5] J. A. Seamons and C. P. Morath and J. L. Reno and M. P. Lilly. (2009). Coulomb Drag in the Exciton Regime in Electron-Hole Bilayers. *Phys. Rev. Lett.* 102. 026804.
- [6] X. Liu and K. Watanabe and T. Taniguchi and B. I. Halperin and P. Kim. (2017). Quantum Hall Drag of Exciton Condensate in Graphene. *Nature Physics* 13. 746–750.
- [7] J. I. A. Li and Q. Shi and Y. Zeng and K. Watanabe and T. Taniguchi and J. Hone and C. R. Dean. (2019). Pairing states of composite fermions in double-layer graphenn. *Nature Physics* 15. 898–903.
- [8] Y.F. Lu, H. Kono, T.I. Larkin, A.W. Rost, T. Takayama, A.V. Boris, B. Keimer, and H. Takagi. (2017). Zero-gap semiconductor to excitonic insulator transition in  $\text{Ta}_2\text{NiSe}_5$ . *Nature Communications*. 8.14408.
- [9] S. Conti, D. Neilson, F. M. Peeters, A. Perali. (2020). Transition Metal Dichalcogenides as Strategy for High Temperature Electron-Hole Superfluidity. *Condens. Matter*. 5. 22.
- [10] L. M. Falicov and J. C. Kimball. (1969). Simple model for semiconductor-metal transitions:  $\text{SmB}_6$  and transition-metal oxides. *Phys. Rev. Lett.* 22. 997.
- [11] R. Ramirez, L. M. Falicov, and J. C. Kimball. (1970). Metal-insulator transitions: A simple theoretical model. *Phys. Rev. B.* 2. 3383.
- [12] Y. Tomio, K. Honda, and T. Ogawa. (2006). Excitonic BCS-BEC crossover at finite temperature: Effects of repulsion and electron-hole mass difference. *Phys. Rev. B.* 73. 235108.
- [13] F. X. Bronold and H. Fehske. (2006). Possibility of an excitonic insulator at the semiconductor-semimetal transition. *Phys. Rev. B.* 74. 165107.
- [14] S. Ejima and T. Kaneko and T. Ohta and H. Fehske. (2014). Order, Criticality, and Excitations in the Extended Falicov-Kimball Model. *Phys. Rev. Lett.* 112. 026401.
- [15] Quoc-Huy Ninh and Van – Nham Phan. (2021). Mass Imbalance Effects in the Excitonic Condensation of the Extended Falicov–Kimball Model. *Phys. Status Solidi B.* 2000564.
- [16] Kwangrae Kim, Hoon Kim, Jonghwan Kim, Changil Kwon, Jun Sung Kim and B. J. Kim. (2021). Direct observation of excitonic instability in  $\text{Ta}_2\text{NiSe}_5$ . *Nat. Commun.* 12.
- [17] P. A. Volkov, Mai Ye, H. Lohani, I. Feldman, A. Kanigel and G. Blumberg. (2021). Critical charge fluctuations and emergent coherence in a strongly correlated excitonic insulator. *npj Quant. Mater.* 6. 52.
- [18] Zhang Yuan-Shan, Bruin, Jan A. N., Matsumoto Yosuke, Isobe Masahiko and Takagi Hidenori. (2021). Thermal transport signatures of the excitonic transition and associated phonon softening in the layered chalcogenide  $\text{Ta}_2\text{NiSe}_5$ . *Phys. Rev. B* 104. L121201.
- [19] Zenker, D. Ihle, F. X. Bronold, and H. Fehske. (2010). On the existence of the excitonic insulator phase in the extended Falicov-Kimball model: A  $\text{SO}(2)$ -invariant slave-boson approach. *Phys. Rev. B* 81. 115122.
- [20] Hai, D.T.H; Nham, P.V. (2022). Excitonic condensation state in the assistance of the adiabatic and anti-adiabatic phonons, *J. Phys.: Condens. Matter* 34, 165602.
- [21] Perali, D. Neilson, A. R. Hamilton. (2013). High-Temperature Superfluidity in Double-Bilayer Graphene. *Phys. Rev. Lett.* 110. 146803.
- [22] Hai, D.T.H; Hoi, B.D; Nham, P.V. (2017). Phonon effects in the excitonic condensation induced in the extended Falicov-Kimball model. *Europhys. Lett.* 119. 47003.
- [23] Zenker, H. Fehske, H. Beck, C. Monney, and A. R. Bishop. (2013). Chiral charge order in  $1\text{T-TiSe}_2$ : Importance of lattice degrees of freedom. *Phys. Rev. B.* 88. 075138.