

Thăng giáng exciton ngưng tụ của hệ điện tử - lỗ trống mất cân bằng khối lượng

Excitonic condensate fluctuations in a mass imbalance electron-hole system

Nguyễn Thị Hậu^{a,b}, Đỗ Thị Hồng Hải^b, Phan Văn Nhâm^{c*}
Nguyen Thi Hau^{a,b}, Do Thi Hong Hai^b, Phan Van Nham^{c*}

^aHọc viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam, 18 Hoàng Quốc Việt, Cầu Giấy, Hà Nội

^aGraduate University of Science and Technology, Vietnam Academy of Science and Technology, 18 Hoang Quoc Viet, Cau Giay, Hanoi

^bTrường Đại học Mỏ - Địa chất, 18 phố Viên, Đức Thắng, Bắc Từ Liêm, Hà Nội, Việt Nam

^bHanoi University of Mining and Geology, 18 Vien street, Duc Thang, Bac Tu Liem, Hanoi, Vietnam

^cViện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Trường Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam

^cInstitute of Research and Development, Duy Tan University, Danang, 550000, Vietnam

(Ngày nhận bài: 20/02/2024, ngày phản biện xong: 29/03/2024, ngày chấp nhận đăng: 22/05/2024)

Tóm tắt

Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu bức tranh thăng giáng trạng thái ngưng tụ exciton của hệ điện tử - lỗ trống mất cân bằng khối lượng. Được mô tả bởi mô hình Falicov-Kimball mở rộng với sự có mặt của tương quan điện tử - phonon, chúng tôi thu được công thức giải tích xác định hàm cảm ứng exciton phụ thuộc vào xung lượng và tần số trên cơ sở của kết quả tự hợp gần đúng Hartree-Fock. Kết quả tính số khẳng định khi nhiệt độ giảm, hàm cảm ứng exciton tăng nhanh và phân kỳ khi nhiệt độ tiến tới giá trị tới hạn, gọi là nhiệt độ chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton. Điều đó cho thấy sự tăng cường của thăng giáng trạng thái exciton kết hợp khi giảm nhiệt độ. Khi sự mất cân bằng khối lượng giảm, thăng giáng trạng thái ngưng tụ exciton tăng. Tuy nhiên, khi khối lượng của điện tử hóa trị đủ nhỏ, độ linh động của điện tử hóa trị tăng lên làm giảm liên kết cặp exciton, thăng giáng trạng thái exciton kết hợp vì vậy bị suy giảm. Điều này có thể được bù trừ khi tăng thể tương tác điện tử - lỗ trống.

Từ khóa: trạng thái ngưng tụ exciton; mô hình Falicov-Kimball mở rộng; phonon; gần đúng Hartree-Fock.

Abstract

The present paper addresses the signatures of the excitonic condensate fluctuations in a mass imbalance electron-hole system. Illustrated by the extended Falicov-Kimball model involving electron-phonon correlations, we release an analytical expression of the static excitonic susceptibility function depending on momentum and frequency in terms of the self-consistent solutions of the Hartree-Fock approximation. Numerical results specify the enhancement of the susceptibility function by lowering temperature. It rapidly increases and then diverges as the temperature reaches a critical value so-called the excitonic condensate transition temperature. That signature indicates the reinforce of the excitonic condensate fluctuations as lowering temperature. Decreasing the mass-imbalance enhances the coherent fluctuations. However, if the mass of the valence electrons become sufficiently small, their mobility is enlarged and the excitonic

*Tác giả liên hệ: Phan Văn Nhâm

Email: pvnham@gmail.com

bound state or the excitonic coherent fluctuation is therefore suppressed. The suppression might be compensated by enhancement of the electron-phonon coupling.

Keywords: excitonic condensation state; extended Falicov-Kimball model; phonons; Hartree-Fock approximation.

1. Mở đầu

Bức tranh ghép cặp của các fermion trong các hệ điện tử nhiều hạt tương quan đang là một trong những chủ đề nghiên cứu hấp dẫn cả trong lý thuyết lẫn thực nghiệm [1,2]. Do các fermion có spin nguyên, khi ghép hai fermion lại ta có một chuẩn hạt spin nguyên hay những hạt boson. Khi nhiệt độ đủ thấp, theo lý thuyết ngưng tụ Bose-Einstein (BEC), các hạt boson có thể tồn tại trên cùng một mức năng lượng, hay chúng ngưng tụ ở trạng thái lượng tử kết hợp. Điển hình là cặp Cooper (liên kết giữa hai điện tử có động lượng và spin trái chiều) trong lý thuyết siêu dẫn của Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS). Trong các hệ có chuyển pha bán kim loại - bán dẫn, một giả hạt tạo bởi sự ghép cặp giữa điện tử ở dải dẫn và lỗ trống ở dải hóa trị có thể được tạo thành do tương tác tĩnh điện Coulomb. Giả hạt này là exciton, cũng có spin nguyên và vì vậy ở nhiệt độ đủ thấp các exciton cũng có thể ngưng tụ ở trạng thái lượng tử kết hợp, gọi là trạng thái điện môi exciton (excitonic insulator - EI) [3].

Để khảo sát trạng thái EI người ta thường sử dụng những mô hình điện tử hai mức năng lượng có tính tới thế tương tác Coulomb của các điện tử giữa các mức năng lượng. Điển hình là mô hình Falicov-Kimball mở rộng (EFK) [4,5]. Mô hình EFK là trường hợp mở rộng của mô hình Falicov-Kimball thông thường khi tính tới sự linh động của các điện tử ở dải hóa trị. Hay nói cách khác, khối lượng hiệu dụng của điện tử ở dải hóa trị là giới hạn. Thông thường, các quan sát thực nghiệm có trạng thái ngưng tụ exciton khẳng định độ rộng của dải hóa trị thường hẹp hơn độ rộng của dải dẫn [6-8]. Điều đó khẳng định khối lượng hiệu dụng của điện tử hóa trị thường lớn hơn khối lượng hiệu dụng của điện tử dẫn, hay hệ điện tử - lỗ trống trong các hệ có chuyển pha bán kim loại - bán dẫn có sự mất cân bằng khối lượng. Khảo

sát bức tranh trạng thái ngưng tụ exciton khi hệ có mất cân bằng khối lượng là cơ sở để chúng ta hiểu rõ bản chất trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ. Những quan sát thực nghiệm cho thấy, ở các hệ có tồn tại trạng thái ngưng tụ exciton, vai trò của phonon rất quan trọng trong việc hình thành và ổn định trạng thái ngưng tụ exciton [7,8]. Để phù hợp với các quan sát thực tế, việc nghiên cứu ảnh hưởng của sự mất cân bằng khối lượng lên sự hình thành trạng thái EI khi có đóng góp của tương quan điện tử-phonon là rất cần thiết. Đó cũng chính là nội dung được chúng tôi trình bày trong bài báo này.

Trong bài báo này, mô hình EFK có tương quan điện tử - phonon được khảo sát trong gần đúng Hartree - Fock, một cách tiếp cận hiệu quả nghiên cứu sự chuyển pha các trạng thái trật tự. Hơn nữa, để hiểu rõ bản chất của chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton, thăng giáng trạng thái ngưng tụ trước khi xảy ra chuyển pha là điều chúng ta cần làm rõ. Bức tranh thăng giáng trạng thái ngưng tụ exciton được thể hiện trên cơ sở của hàm cảm ứng exciton. Với gần đúng pha ngẫu nhiên, hàm cảm ứng exciton trong mô hình EFK có tương tác điện tử - phonon được khảo sát. Kết quả của hàm cảm ứng exciton ở trạng thái phi trật tự là cơ sở để chúng ta thảo luận bức tranh thăng giáng trước khi xảy ra trạng thái ngưng tụ exciton.

Trong phần tiếp theo của bài báo, chúng tôi trình bày mô hình EFK có tính tới tương tác điện tử-phonon. Kết quả giải tích các phương trình tự hợp thu được trong gần đúng Hartree-Fock và hàm cảm ứng exciton trong gần đúng pha ngẫu nhiên cũng được trình bày trong phần này. Phần 3 trình bày các kết quả tính số mô tả thăng giáng trạng thái ngưng tụ exciton thông qua khảo sát hàm cảm ứng exciton tĩnh. Kết luận của bài báo được chúng tôi trình bày trong phần 4.

2. Mô hình và tính toán lí thuyết

Hamiltonian mô tả tương quan của hệ điện tử ở dải dẫn và dải hóa trị khi tính tới tương tác điện tử - phonon được viết dưới dạng

$$H = H_e + H_{ph} + H_{int} \quad (1)$$

Số hạng đầu trong phương trình (1) mô tả năng lượng của hệ điện tử c ở dải dẫn và điện tử f ở dải hóa trị khi không tương tác

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \quad (2)$$

trong đó, $c_{\mathbf{k}}^\dagger (c_{\mathbf{k}})$ và $f_{\mathbf{k}}^\dagger (f_{\mathbf{k}})$ tương ứng là các toán tử sinh (hủy) của điện tử c và điện tử f không spin mang xung lượng \mathbf{k} . Trong gần đúng liên kết chặt, các năng lượng kích thích điện tử c và f được cho bởi

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{c(f)} = \varepsilon^{c(f)} - t^{c(f)} \gamma_{\mathbf{k}} - \mu \quad (3)$$

với $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{c(f)}$ là năng lượng trên một nút của điện tử $c (f)$. Sự khác nhau của hai giá trị năng lượng này

$$H_{int} = \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}'} + \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \left(c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}} (b_{-\mathbf{q}}^\dagger + b_{\mathbf{q}}) + f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^\dagger + b_{-\mathbf{q}}) \right) \quad (5)$$

Trong đó N là số nút mạng tinh thể, U là cường độ thế tương tác Coulomb giữa điện tử trên dải dẫn và điện tử ở dải hóa trị và g là hằng số tương tác điện tử - phonon.

Hamiltonian viết ở phương trình (1) là một Hamiltonian của hệ nhiều hạt. Việc giải chính xác một Hamiltonian như vậy là điều không thể

$$c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{q},0} \left[\langle f_{\mathbf{k}'}^\dagger f_{\mathbf{k}'} \rangle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle f_{\mathbf{k}'}^\dagger f_{\mathbf{k}'} - \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle \langle f_{\mathbf{k}'}^\dagger f_{\mathbf{k}'} \rangle \right] \quad (6)$$

Ở trạng thái phi trật tự trạng thái ngưng tụ exciton, đóng góp của tương tác điện tử-phonon là bằng 0 trong gần đúng HF, khi đó Hamiltonian (1) trong gần đúng HF có dạng

$$H_{HF} = \sum_{\mathbf{k}} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} + \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \quad (8)$$

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

cho mức độ xen phủ của hai dải năng lượng. Sự xen phủ của hai dải năng lượng còn phụ thuộc vào t^c và t^f tương ứng là các tích phân nhảy nút của điện tử c và điện tử f . Thông thường $t^f < t^c$ thể hiện điện tử f nặng hơn điện tử c . Nói cách khác, khác nhau giữa t^c và t^f thể hiện sự mất cân bằng khối lượng của hệ điện tử trong hệ. Trong mạng tinh thể hai chiều hình vuông với hằng số mạng bằng 1, ta có $\gamma_{\mathbf{k}} = 2(\cos k_x + \cos k_y)$ còn μ là thế hóa học.

Số hạng H_{ph} trong phương trình (1) mô tả hệ phonon không tương tác được biểu diễn bởi

$$H_{ph} = \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \quad (4)$$

với $b_{\mathbf{q}}^\dagger$ và $b_{\mathbf{q}}$ tương ứng là toán tử sinh và hủy phonon tại xung lượng \mathbf{q} , ω_0 là năng lượng phonon không tương tác trong mô hình Einstein. Số hạng cuối cùng trong phương trình (1) mô tả tương tác trong hệ được viết dưới dạng

và người ta phải tìm các phép tính gần đúng. Trong phạm vi nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng gần đúng Hartree-Fock (HF). Khi chỉ quan tâm tới trạng thái thăng giáng của liên kết cặp exciton trước khi xảy ra trạng thái ngưng tụ, gần đúng HF cho phép ta viết lại toán tử trong tương tác Coulomb ở trạng thái phi trật tự dưới dạng

$$\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{c(f)} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{c(f)} + U n^{f(c)} \quad (9)$$

trong đó $n^{f(c)} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}}^{f(c)} \rangle$ tương ứng là mật độ điện tử f và $n^{c(f)}$ mật độ điện tử c với $\langle n_{\mathbf{k}}^f \rangle = \langle f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle$ và $\langle n_{\mathbf{k}}^c \rangle = \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle$. Hamiltonian viết ở phương trình (8) có dạng chéo hóa, vì vậy ta hoàn toàn có thể xác định được các hàm mật độ điện tử thông qua hàm phân bố Fermi-Dirac

$$\begin{aligned} \langle n_k^f \rangle &= \langle f_k^\dagger f_k \rangle = \frac{1}{1 + e^{\beta \bar{\epsilon}_k^f}} \\ \langle n_k^c \rangle &= \langle c_k^\dagger c_k \rangle = \frac{1}{1 + e^{\beta \bar{\epsilon}_k^c}} \end{aligned} \quad (10)$$

với $\beta = 1/T$ là nghịch đảo của nhiệt độ tuyệt đối T.

Như vậy, từ các phương trình (9-10) chúng ta có một hệ phương trình có thể giải một cách tự hợp xác định năng lượng và mật độ của hạt tải trên dải dẫn và dải hóa trị trong không gian xung

$$\omega \langle \langle f_k^\dagger c_{k+q}; c_{k'+q}^\dagger f_{k'} \rangle \rangle_{(\omega)} = \langle \langle [f_k^\dagger c_{k+q}; c_{k'+q}^\dagger f_{k'}] \rangle \rangle + \langle \langle [f_k^\dagger c_{k+q}, H]; c_{k'+q}^\dagger f_{k'} \rangle \rangle_{(\omega)} \quad (12)$$

Trong đó Hamiltonian H được cho trong phương trình (1). Ở gần đúng pha ngẫu nhiên, chúng tôi thu được kết quả của hàm cảm ứng

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-\chi^{01}(\mathbf{q}, \omega)}{1 + (U - g\Gamma_{\mathbf{q}})\chi^{01}(\mathbf{q}, \omega)} \quad (13)$$

$$\text{với } \chi^{01}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\langle n_k^f \rangle - \langle n_{k+q}^c \rangle}{\omega - \bar{\epsilon}_{k+q}^c + \bar{\epsilon}_k^f} \quad (14)$$

$$\text{và } \Gamma_{\mathbf{q}} = \frac{2g\omega_0}{\omega^2 - \omega_0^2 - \frac{2g^2\omega_0\chi^{02}(\mathbf{q}, \omega)}{1 + U\chi^{02}(\mathbf{q}, \omega)}} \quad (15)$$

trong đó

$$\chi^{02}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\langle n_{k-q}^c \rangle - \langle n_k^f \rangle}{\omega - \bar{\epsilon}_k^f + \bar{\epsilon}_{k-q}^c} \quad (16)$$

Ở giới hạn $\omega \rightarrow 0$ ta có hàm cảm ứng exciton tĩnh. Trong bài báo này, chúng tôi chỉ xét các exciton có xung lượng $\mathbf{q} = 0$ tham gia vào sự hình thành trạng thái ngưng tụ EI, vì vậy bức tranh thăng giáng trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ được chúng tôi khảo sát thông qua hàm cảm ứng exciton tĩnh $\chi_0 = \chi(\mathbf{0}, 0)$.

3. Kết quả và thảo luận

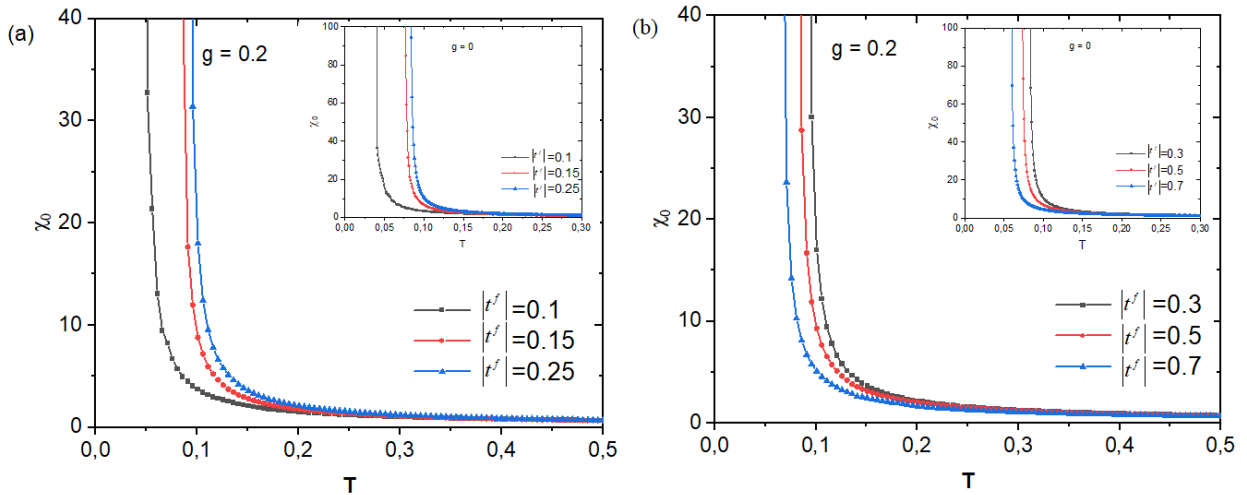
Từ kết quả tính giải tích trong phần 2, chúng tôi sử dụng phương pháp tính số giải tự hợp hệ

lượng. Kết quả đó giúp chúng tôi xác định hàm cảm ứng exciton từ đó khảo sát bức tranh thăng giáng exciton trước khi xảy ra trạng thái ngưng tụ. Trong không gian xung lượng, hàm cảm ứng exciton có dạng

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{N} \sum_{kk'} \langle \langle f_k^\dagger c_{k+q}; c_{k'+q}^\dagger f_{k'} \rangle \rangle_{(\omega)} \quad (11)$$

Bằng phương pháp phương trình chuyển động, hàm Green hai hạt ở công thức (11) có thể viết dưới dạng sau

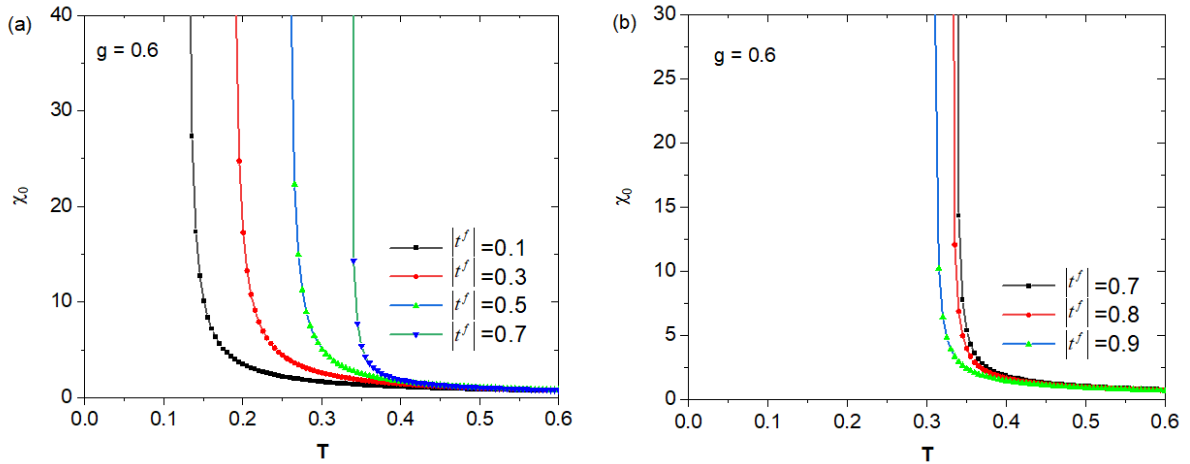
phương trình (9-10) sau đó xác định hàm cảm ứng exciton tĩnh theo phương trình (13) để khảo sát ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng lên bức tranh thăng giáng trạng thái ngưng tụ exciton. Hàm cảm ứng exciton thể hiện sự thăng giáng exciton trong hệ, do đó hàm cảm ứng exciton phân kỳ chứng tỏ sự hình thành của trạng thái EI. Ở đây, chúng tôi chọn hệ đơn vị tự nhiên với $\hbar = c = k_B = 1$ và tính toán cho hệ hai chiều gồm $N = 500 \times 500$ nút mạng. Không mất tính tổng quát, chúng tôi chọn tích phân nhảy nút của điện tử c là đơn vị của năng lượng ($t^c = 1$), còn tích phân nhảy nút của điện tử f luôn được chọn sao cho $|t^f| \leq 1$ để phù hợp với các hệ có chuyển pha bán kim loại – bán dẫn. Với cách chọn như vậy, giá trị của $|t^f|$ sẽ thể hiện sự mất cân bằng khối lượng của điện tử c và điện tử f trong hệ, nếu $|t^f|$ tăng thể hiện sự giảm cân bằng khối lượng. Các nghiên cứu trước đây đã chỉ ra rằng trạng thái EI chỉ được hình thành khi cường độ thế tương tác Coulomb và áp suất ngoài đủ lớn [6-8]. Do đó, khi tính số chúng tôi cố định cường độ thế tương tác Coulomb $U = 2,5$ và mức độ xen phủ của hai dải năng lượng điện tử $\epsilon^c - \epsilon^f = 2$ để khảo sát hàm cảm ứng exciton tĩnh theo nhiệt độ.



Hình 1. Hàm cảm ứng exciton tĩnh phụ thuộc nhiệt độ với các giá trị khác nhau của $|t^f|$ tại $U = 2.5, \epsilon^c - \epsilon^f = 2$ và $g = 0.2$. Hình nhỏ là hàm cảm ứng trong trường hợp $g=0$.

Hình 1 mô tả sự phụ thuộc của hàm cảm ứng exciton tĩnh theo nhiệt độ ứng với các giá trị khác nhau của $|t^f|$ khi hằng số tương tác điện tử - phonon $g = 0.2$. Ứng với mỗi giá trị của $|t^f|$ ta luôn thu được cùng một dáng điệu của hàm cảm ứng exciton tĩnh phụ thuộc nhiệt độ, cụ thể, hàm cảm ứng tăng khi giảm nhiệt độ. Đặc biệt, khi nhiệt độ đủ nhỏ hàm cảm ứng tăng nhanh và phân kỳ khi nhiệt độ tiến tới giá trị tới hạn T_c . Nhiệt độ T_c ở đây được gọi là nhiệt độ chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton. Như vậy, ta nhận thấy, khi nhiệt độ lớn, thăng giáng nhiệt phá vỡ mọi liên kết cặp điện tử - lỗ trống và hệ ở trạng thái khí fermi. Hàm cảm ứng vì vậy rất nhỏ. Giảm dần nhiệt độ, thăng giáng nhiệt giảm và trạng thái liên kết có thể hình thành. Thăng giáng trạng thái ngưng tụ exciton thể hiện rõ khi nhiệt độ giảm tiến tới nhiệt độ chuyển pha T_c . Khi $|t^f|$ nhỏ hay sự mất cân bằng khối lượng giữa điện tử dẫn và điện tử hóa trị lớn, Hình 1a cho thấy, khi tăng $|t^f|$ nhiệt độ tới hạn T_c tăng. Điều này thể hiện việc giảm khối lượng của hạt tải hóa trị, các điện tử hóa trị dễ dàng lai hóa với điện tử ở mức dẫn để hình thành trạng thái liên kết cặp điện tử - lỗ trống, tăng mức độ thăng giáng trạng thái ngưng tụ exciton. Tuy nhiên,

trong vùng $|t^f|$ đủ lớn, $|t^f| \geq 0.3$, (Hình 1b) cho chúng ta thấy bức tranh thăng giáng trái ngược của trạng thái exciton kết hợp khi giảm mất cân bằng khối lượng. Thực vậy, trong trường hợp này, tăng $|t^f|$ dẫn tới giảm nhiệt độ chuyển pha trạng thái ngưng tụ exciton. Nói cách khác, giảm mất cân bằng khối lượng làm giảm thăng giáng trạng thái exciton kết hợp. Điều này có thể giải thích khi $|t^f|$ đủ lớn, dài hóa trị và dài dẫn xen phủ nhau và hệ ở trạng thái bán kim loại, thay vì trạng thái bán dẫn như trường hợp mất cân bằng khối lượng lớn. Khi ở trạng thái bán kim loại, tăng $|t^f|$ làm tăng độ linh động của điện tử hóa trị và vì vậy exciton được hình thành với liên kết yếu hơn. Các cặp điện tử dẫn và điện tử hóa trị của yếu rất gần mức Fermi mới đóng vai trò liên kết. Nhiệt độ chuyển pha ngưng tụ exciton vì thế giảm khi tăng độ linh động của điện tử hóa trị, hay khi giảm sự mất cân bằng khối lượng. So sánh với hàm cảm ứng exciton tĩnh khi chưa có tương tác điện tử - phonon (hình nhỏ bên trong mỗi hình), chúng tôi thấy rằng nhiệt độ chuyển pha T_c khi có tương tác điện tử - phonon tăng lên so với trường hợp không có tương tác điện tử - phonon, nguyên nhân là do tương tác điện tử - phonon làm tăng khả năng ghép cặp điện tử $c-f$.



Hình 2. Hàm cảm ứng exciton tĩnh phụ thuộc nhiệt độ ứng với các giá trị của $|t^f|$ tại $g = 0.6$

Để thấy rõ vai trò của ảnh hưởng của sự mất cân bằng khối lượng lên bức tranh thăng giáng trạng thái ngưng tụ exciton khi mặt của tương tác điện tử - phonon, trên Hình 2, chúng tôi tiếp tục khảo sát hàm cảm ứng exciton tĩnh khi $g = 0.6$. Với giá trị lớn của thể tương tác điện tử - phonon chúng ta vẫn thu được bức tranh tương tự của thăng giáng exciton phụ thuộc vào nhiệt độ và sự mất cân bằng khối lượng. Thực vậy, khi giảm nhiệt độ, hàm cảm ứng exciton tăng dần và đặc biệt hàm cảm ứng tăng mạnh rồi phân kỳ nhiệt độ tiến tới giá trị tới hạn, là vị trí tại đó hệ chuyển sang trạng thái ngưng tụ exciton. Ở vùng $|t^f| < 0.7$, nhiệt độ chuyển pha trạng thái ngưng tụ tăng khi sự mất cân bằng khối lượng giảm (Hình 2a). So với Hình 1a, rõ ràng vai trò tương tác điện tử - phonon đóng vai trò quan trọng trong sự hình thành thăng giáng trạng thái liên kết cặp. Cụ thể do tương tác điện tử - phonon đủ lớn, liên kết cặp exciton được tăng cường. Điều này càng được thúc đẩy khi điện tử hóa trị trở nên linh động hơn. Tuy nhiên, khi $|t^f|$ đủ lớn, $|t^f| \geq 0.7$ thì chúng ta vẫn thấy thăng giáng trạng thái exciton kết hợp trở nên suy giảm khi tăng $|t^f|$ (Hình 2b). Thực vậy, trong trường hợp này, điện tử hóa trị trở nên linh động gần như so với điện tử dẫn, liên kết exciton vì vậy trở nên yếu hơn và khi đó đòi hỏi tương tác điện tử - phonon phải lớn hơn nữa để ta có thể thấy được sự tăng cường của liên kết cặp exciton khi giảm sự mất cân

bằng khối lượng giữa điện tử dẫn và điện tử hóa trị.

4. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã khảo sát bức tranh thăng giáng trạng thái exciton kết hợp của hệ điện tử - lỗ trống mất cân bằng khối lượng trong các hệ có chuyển pha bán kim loại - bán dẫn, thông qua nghiên cứu mô hình Falicov-Kimball mở rộng khi tính tới đóng góp của tương quan điện tử-phonon. Khi áp suất ngoài và thể tương tác Coulomb giữa điện tử dẫn và điện tử hóa trị đủ lớn, thăng giáng exciton được xác định khi nhiệt độ gần nhiệt độ tới hạn trạng thái ngưng tụ exciton. Thăng giáng trạng thái exciton kết hợp được tăng cường khi giảm khối lượng hiệu dụng của điện tử hóa trị. Tuy nhiên, khi khối lượng hiệu dụng của điện tử hóa trị trở nên so sánh được với điện tử dẫn thì thăng giáng trạng thái ngưng tụ exciton lại giảm khi tiếp tục tăng độ linh động của điện tử hóa trị. Thể tương tác điện tử - phonon đóng vai trò quan trọng khi mở rộng vùng thăng giáng trạng thái exciton kết hợp khi giảm mất cân bằng khối lượng. Kết quả này khẳng định vai trò quan trọng của mất cân bằng khối lượng và tương tác điện tử - phonon ảnh hưởng lên bức tranh thăng giáng trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ có chuyển pha bán kim loại - bán dẫn.

Lời cảm ơn

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

References

- [1] A. Kavokin, T. C. H. Liew, C. Schneider, P. G. Lagoudakis, S. Klemmt, and S. Hoefling. (2022). Polariton condensates for classical and quantum computing, *Nat. Rev. Phys.* 4, 435.
- [2] E. C. Regan, D. Wang, E. Y. Paik, Y. Zeng, L. Zhang, J. Zhu, A. H. MacDonald, H. Deng, and F. Wang. (2022). Emerging exciton physics in transition metal dichalcogenide heterobilayers, *Nat. Rev. Mater.* 7, 778.
- [3] N. F. Mott. (1961). The transition to the metallic state, *Phil. Mag.* 6, 287.
- [4] D. Ihle, M. Pfafferoth, E. Burovski, F. X. Bronold, and H. Fehske. (2008). Bound state formation and the nature of the excitonic insulator phase in the extended Falicov-Kimball model, *Phys. Rev. B* 78, 193103.
- [5] V.-N. Phan, K. W. Becker, and H. Fehske. (2010). Spectral signatures of the BCS-BEC crossover in the excitonic insulator phase of the extended Falicov-Kimball model, *Phys. Rev. B* 81, 205117.
- [6] C. Monney, C. Battaglia, H. Cercellier, P. Aebi and H. Beck. (2021). Exciton condensation driving the periodic lattice distortion of 1T-TiSe₂, *Phys. Rev. Lett.* 106, 106404.
- [7] Kwangrae Kim, Hoon Kim, Jonghwan Kim. Changil Kwon, Jun Sung Kim and B. J. Kim. (2021). Direct observation of excitonic instability in Ta₂NiSe₅. *Nat. Commun.* 12, 1969.
- [8] P. Wachter. (2001). Exciton condensation in an intermediate valence compound: TmSe_{0.45}Te_{0.55}, *Sol. Sta. Commu.* 118, 645.