



Tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton của hệ điện tử - lỗ trống trong từ trường

Excitonic condensate order parameters of the electron-hole system in a magnetic field

Phan Văn Nhâm^{a,b,*}, Ninh Quốc Huy^c
Phan Van Nham^{a,b,*}, Ninh Quoc Huy^c

^a*Viện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam*

^a*Institute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Viet Nam*

^b*Khoa Môi trường và Khoa học tự nhiên, Trường Công nghệ và Kỹ thuật, Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam*

^b*Faculty of Environmental and Natural Sciences, School of Engineering and Technology, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Viet Nam*

^c*Cao đẳng Sư phạm Lạng Sơn, Đèo Giang, 25000 Lạng Sơn, Việt Nam*

^c*Lang Son College of Education, Deo Giang, Lang Son, 25000, Viet Nam*

(Ngày nhận bài: 23/11/2024, ngày phản biện xong: 03/12/2024, ngày chấp nhận đăng: 11/03/2025)

Tóm tắt

Trong bài báo này, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của từ trường lên tính chất của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ của exciton trong hệ bán kim loại. Trong các hệ bán kim loại, hệ điện tử - lỗ trống được mô tả bằng mô hình Falicov Kimball mở rộng. Khi có mặt của từ trường, các mức năng lượng của điện tử bị tách theo hiệu ứng Zeeman. Vai trò spin của hạt tải vì vậy đóng vai trò quan trọng trong việc hình thành trạng thái ghép cặp điện tử - lỗ trống. Bằng gần đúng Hartree-Fock, tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton có thể được xác định một cách tự hợp. Kết quả tính số khẳng định vai trò quan trọng của từ trường trong sự tồn tại của trạng thái ngưng tụ exciton. Khi từ trường đủ lớn, các mức năng lượng xung quanh mức Fermi tách đủ xa và tất cả trạng thái ngưng tụ exciton khả dĩ bị phá hủy.

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

Abstract

In the present paper, we investigate the impacts of the magnetic field on the nature of the excitonic condensate order parameters in semimetal materials. In the materials, the electron-hole system is described by the extended Falicov-Kimball model. In the magnetic field, electronic bands are splitted due to the Zeeman effect. The spin of the carriers thus plays important roles in the formation and condensed process of the excitons. Using the Hartree-Fock approximation, we self-consistently find the excitonic condensation order parameters. Numerical results specify the significant roles of the magnetic field in the formation and stability of the excitonic condensation. In case of sufficient large values of the magnetic field, the electronic energy bands around the Fermi level strongly separate and all possible excitonic condensates are suppressed.

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

*Tác giả liên hệ: Phan Văn Nhâm
Email: phanvannham@duytan.edu.vn

1. Mở đầu

Trạng thái ngưng tụ exciton trong các hệ có chuyển pha kim loại/bán kim loại được đề xuất từ những năm 60 của thế kỷ trước [1,2] nhưng tới nay nó vẫn luôn được quan tâm khi đang có xu hướng mở ra một kỷ nguyên mới vì những ứng dụng lớn trong công nghệ với khả năng tồn tại trạng thái ngưng tụ Bose-Einstein ở nhiệt độ phòng [3]. Khi tương tác Coulomb giữa điện tử và lỗ trống đủ lớn, exciton hình thành. Trong điều kiện nhiệt độ đủ thấp, những exciton này có thể cùng tồn tại ở một trạng thái lượng tử, hay còn gọi là trạng thái ngưng tụ exciton [1,2]. Trạng thái ngưng tụ exciton này giống với trạng thái siêu dẫn mô tả bởi lý thuyết của Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS), khi trạng thái siêu dẫn được hình thành do sự ngưng tụ của các cặp Cooper một trạng thái ghép cặp của các điện tử với spin trái chiều [4]. Ở lý thuyết BCS, trạng thái siêu dẫn có thể tồn tại miễn cường độ tương tác ghép cặp khác không [4]. Điều này hoàn toàn khác với trạng thái ngưng tụ exciton trong các hệ có chuyển pha bán kim loại, bán dẫn. Ở đó, trạng thái ngưng tụ exciton chỉ tồn tại trong một khoảng xác định của cường độ tương tác [5,6]. Tùy vào cường độ tương tác Coulomb, các exciton có thể tồn tại giống như trạng thái siêu dẫn của các cặp Cooper khi tương tác yếu hay tồn tại giống như các nguyên tử trung hòa khi tương tác mạnh. Cũng khác với trạng thái siêu dẫn, nơi mà dòng điện tồn tại vĩnh cửu, hay siêu dẫn luôn là một chất dẫn điện, thì với trạng thái ngưng tụ exciton, hệ không dẫn điện hay là chất điện môi vì exciton là một hạt trung hòa về điện. Nghiên cứu trạng thái ngưng tụ exciton trong vật liệu vì vậy có nhiều điều hấp dẫn, mở ra những trạng thái lượng tử thú vị của hệ điện tử tương quan [3].

Trong hầu hết các nghiên cứu lý thuyết trạng thái ngưng tụ exciton, điện tử và lỗ trống luôn được xem là những hạt tải không spin để đơn giản hóa quá trình khảo sát trạng thái ghép cặp

[5-9]. Tuy nhiên, trong thực tế, điện tử và lỗ trống đều là những hạt có spin bán nguyên. Việc ghép cặp giữa các spin cùng hay trái chiều luôn cho ta những bức tranh liên kết phức tạp nhưng thú vị như đơn tuyến hay tam tuyến. Đặc biệt, khi có mặt của từ trường thì spin của hạt tải trong việc hình thành các trạng thái ghép cặp giữa các điện tử không thể bỏ qua. Trong bài báo này, chúng tôi sẽ khảo sát chi tiết ảnh hưởng của từ trường lên trạng thái ghép cặp giữa điện tử ở dải dẫn và lỗ trống ở dải hóa trị trong các hệ có chuyển pha bán dẫn, bán kim loại. Khi có mặt của từ trường, dải năng lượng suy biến của điện tử bị tách ra theo hiệu ứng Zeeman tùy theo hướng spin cùng hay khác với hướng của vectơ từ trường. Tương tự, dải năng lượng của lỗ trống cũng thế và vì vậy, thay vì hai mức năng lượng của điện tử và lỗ trống, khi có mặt của từ trường, hệ tồn tại bốn mức năng lượng. Bức tranh ghép cặp của điện tử và lỗ trống vì vậy trở nên thú vị và phức tạp hơn.

Để mô tả hệ điện tử-lỗ trống và từ đó xác định trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ có chuyển pha bán kim loại khi có mặt của từ trường chúng tôi sử dụng mô hình Falicov-Kimball mở rộng khi tính tới spin của hạt tải. Bằng gần đúng Hartree-Fock, chúng tôi thu được một Hamiltonian có thể chéo hóa. Đó là cơ sở để chúng tôi xây dựng hệ phương trình tự hợp cho phép xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton. Khảo sát tất cả các trạng thái ghép cặp có thể giữa điện tử ở dải dẫn và lỗ trống ở dải hóa trị khi có mặt của từ trường, chúng tôi mô tả ảnh hưởng của từ trường lên bức tranh ghép cặp. Kết quả tính số khẳng định sự tồn tại đồng thời cả 4 trạng thái ghép cặp giữa các hướng spin khả dĩ của điện tử và lỗ trống khi từ trường nhỏ. Tuy nhiên, khi từ trường đủ lớn, tất cả các trạng thái ghép cặp bị phá vỡ và hệ không còn ở trạng thái ngưng tụ.

Ngoài phần mở đầu này, phần còn lại của bài báo được chia làm 3 phần. Phần 2 trình bày

Hamiltonian mô tả hệ điện tử lỗ trống trong từ trường và gần đúng Hartree Fock để thu được hệ phương trình tự hợp xác định tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton. Phần 3 trình bày kết quả tính số, mô tả sự phụ thuộc của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ vào cường độ từ trường ngoài. Cuối cùng là kết luận.

2. Hamiltonian và gần đúng Hartree-Fock

Để mô tả hệ điện tử-lỗ trống khi có mặt của từ trường ngoài trong các chất có chuyển pha bán kim loại, bán dẫn, chúng tôi sử dụng Hamiltonian biểu diễn trong bức tranh lượng tử hóa thứ cấp. Trong không gian xung lượng, Hamiltonian được viết dưới dạng

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}}^c - H^z \sigma) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}}^f - H^z \sigma) f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma'} \quad (1)$$

Ở đây, $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (c_{\mathbf{k}\sigma})$ và $f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (f_{\mathbf{k}\sigma})$ tương ứng là các toán tử sinh (hủy) của điện tử trên dải dẫn c và điện tử trên dải hóa trị f có xung lượng $\mathbf{k}$ và spin σ . $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{c,f}$ là các hệ thức tán sắc của điện tử dải dẫn và điện tử hóa trị. Trong gần đúng liên kết chặt, các hệ thức tán sắc được cho bởi

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

trong đó, $\varepsilon^{c(f)}$ là các năng lượng trên một nút của điện tử $c (f)$. Sự khác nhau của các năng lượng trên nút $\Delta\varepsilon = \varepsilon^c - \varepsilon^f$ cho ta mức độ xen phủ của hai dải hóa trị và dải dẫn khi chưa có tương tác và từ trường. t^c và t^f lần lượt là các tích phân nhảy nút của điện tử dải dẫn và điện tử hóa trị. Ta xét trường hợp $t^f = -t^c$ như một ví dụ điển hình khảo sát trạng thái ghép cặp giữa điện tử dải dẫn và điện tử hóa trị và không mất tính tổng quát ta chọn $t^c = 1$ như là đơn vị năng lượng. Với một mạng vuông 2 chiều, với hằng số mạng bằng 1, ta có $\gamma_{\mathbf{k}} = 2(\cos k_x + \cos k_y)$. μ trong công thức (2) là thế hóa học. Khi có mặt của từ

trường, hệ thức tán sắc của điện tử ở dải dẫn và điện tử ở dải hóa trị trong công thức (2) được viết lại là $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{c(f)} - H^z \sigma$, với H^z là cường độ từ trường ngoài. Số hạng thứ 3 trong công thức (1) mô tả tương tác Coulomb giữa điện tử trên dải dẫn và điện tử trên dải hóa trị trên cùng một nút với cường độ tương tác U . Hamiltonian viết ở công thức (1) chính là mô hình Falicov-Kimball mở rộng, đã được sử dụng trong việc nghiên cứu trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ bán kim loại/bán dẫn khi không có mặt của từ trường ngoài [5-9].

Như vậy, Hamiltonian viết ở công thức (1) là một Hamiltonian mô tả hệ nhiều điện tử tương quan. Việc thu được kết quả chính xác lời giải cho Hamiltonian này là không thể, và ta phải tìm các phép gần đúng. Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng gần đúng Hartree-Fock. Giả thiết hệ đang ở trạng thái ngưng tụ exciton, khi đó toán tử ở số hạng tương tác có thể viết dưới dạng

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma'} &= \delta_{\mathbf{q}, 0} \left[\langle f_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle f_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma'} - \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \langle f_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle \right] \\ &\quad - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \left[\langle c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \langle f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma'} - \langle c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle \langle f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \right] \end{aligned} \quad (3)$$

Bỏ qua các hằng số, ta thu được biểu diễn của Hamiltonian trong gần đúng Hartree-Fock

$$\mathcal{H}_{HF} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma}^c c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma}^f f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} (\Delta_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma'} + \text{H.c.}) \quad (4)$$

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 và từ trường ngoài, được xác định bởi

$$\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma}^{c(f)} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{c(f)} + U n^{f(c)} - H^z \sigma \quad (5)$$

trong đó $n^{f(c)} = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle n_{k\sigma}^{f(c)} \rangle$ lần lượt là các mật độ điện tử f và mật độ điện tử c trên một nút với $\langle n_{k\sigma}^f \rangle = \langle f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} \rangle$ và $\langle n_{k\sigma}^c \rangle = \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle$ là các mật độ hạt tải trên dải hóa trị và dải dẫn ứng với xung lượng $\mathbf{k}$ và spin σ .

Với

$$H = \begin{bmatrix} \varepsilon_k^c + Un^f - H^z & 0 & \Delta_{\uparrow\uparrow} & \Delta_{\uparrow\downarrow} \\ 0 & \varepsilon_k^c + Un^f + H^z & \Delta_{\downarrow\uparrow} & \Delta_{\downarrow\downarrow} \\ \Delta_{\uparrow\uparrow}^\dagger & \Delta_{\uparrow\downarrow}^\dagger & \varepsilon_k^f + Un^c - H^z & 0 \\ \Delta_{\downarrow\uparrow}^\dagger & \Delta_{\downarrow\downarrow}^\dagger & 0 & \varepsilon_k^f + Un^c + H^z \end{bmatrix} \quad (7)$$

Chéo hóa ma trận này ta thu được các trị riêng và vectơ riêng, là cơ sở để xác định các tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton và mật độ điện tử trên dải dẫn và trên dải hóa trị. Giải các phương trình một cách tự hợp chúng ta thu được tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton phụ thuộc vào từ trường.

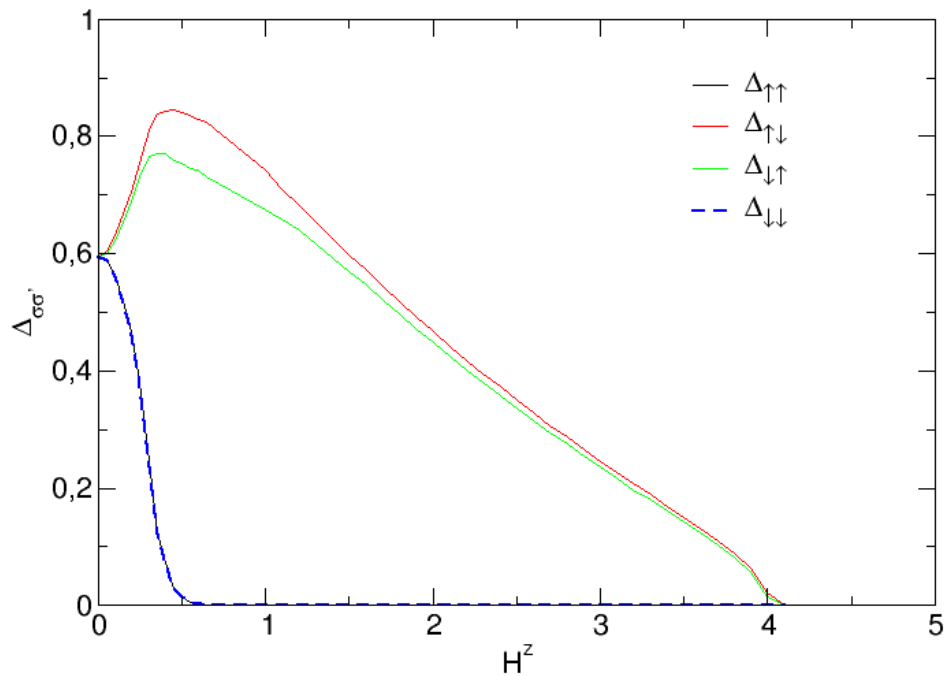
3. Kết quả và thảo luận

Trên cơ sở của tính toán giải tích ở phần trên, chúng tôi tiến hành lập trình, tính số xác định kết quả của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton $\Delta_{\sigma\sigma'}$. Với một hệ 2 chiều gồm $N=700 \times 700$ nút mạng, trong không gian xung lượng và những giá trị ban đầu của tham số trật tự exciton và mật độ điện tử trên dải dẫn và trên dải hóa trị, ma trận (7) được chéo hóa để tìm các

Hamiltonian viết ở phương trình (8) hoàn toàn có thể chéo hóa. Cụ thể ta có thể viết Hamiltonian ở dạng ma trận (4×4) với $\psi_k = (c_{k\uparrow}, c_{k\downarrow}, f_{k\uparrow}, f_{k\downarrow})^T$. Cụ thể

$$\mathcal{H}_{HF} = \sum_k \psi_k^\dagger H \psi_k \quad (6)$$

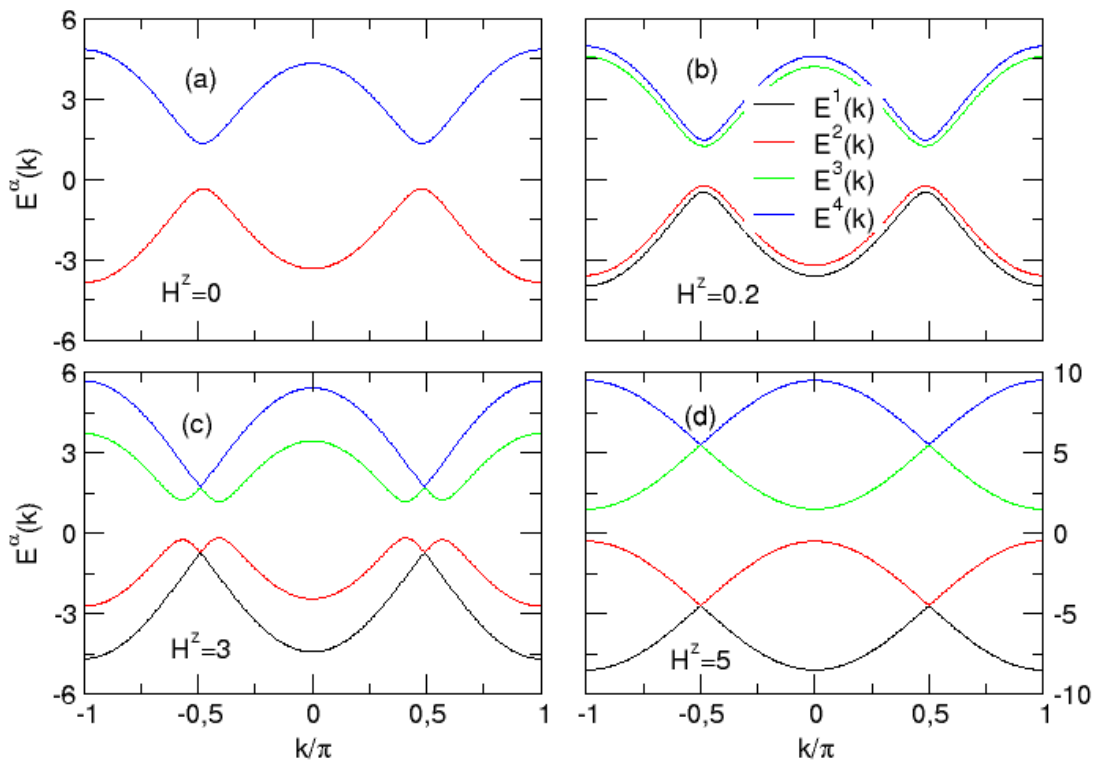
trị riêng và vectơ riêng. Chú ý rằng các tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton $\Delta_{\sigma\sigma'}$ tổng quát là những số phức. Với kết quả của trị riêng và vectơ riêng, chúng ta xác định được các tham số trật tự và các mật độ hạt tải trên các dải dẫn và hóa trị. Các giá trị này lại được dùng như kết quả đầu vào cho quá trình tính tiếp theo. Cứ thế, quá trình tính toán được lặp đi lặp lại cho tới khi kết quả hội tụ. Quá trình được xem như hội tụ nếu tổng sai số tương đối của các đại lượng nhỏ hơn 10^{-4} . Xem như tương tác Coulomb đóng vai trò quan trọng, chúng tôi cố định $U=3$ và các đại lượng được xác định trong đơn vị $t^c=1$ trong hệ đơn vị tự nhiên $\hbar=c=k_B=1$. Giả thiết hệ ở trạng thái bán kim loại, không mất tính tổng quát ta chọn $\Delta\varepsilon=0$ khi hệ lấp đầy một nửa, $n=n^c+n^f=2$ và ở nhiệt độ $T=0$.



Hình 1. Biên độ tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton $|\Delta_{\sigma\sigma'}|$ phụ thuộc vào cường độ từ trường ngoài H^z .

Hình 1 mô tả sự phụ thuộc module của các tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton $|\Delta_{\sigma\sigma'}|$ vào từ trường ngoài H^z khi tương tác Coulomb đủ lớn, $U=3$. Kết quả tính toán số cho ta thấy, tại $H^z=0$, hệ không nằm trong từ trường ngoài vẫn tồn tại trạng thái ngưng tụ exciton, tương ứng với $|\Delta_{\sigma\sigma'}| \neq 0$. Điều này cho thấy, do tác dụng của thể tương tác Coulomb, trạng thái ghép cặp exciton giữa điện tử ở dải dẫn và lỗ trống (hay điện tử sau phép biến đổi điện tử - lỗ trống) ở dải hóa trị đã ghép cặp và trạng thái lượng tử kết hợp hình thành. Trạng thái này thể hiện bằng sự xuất hiện của khe năng lượng tại mức Fermi, tỉ lệ với $|\Delta_{\sigma\sigma'}|$, $|\Delta_{\sigma\sigma'}|$ vì vậy còn gọi là tham số trật tự trạng thái lượng tử kết hợp. Vì hệ ở trạng thái bán kim loại, bức tranh này hoàn toàn giống với bức tranh siêu dẫn trong lý thuyết của BCS. Trạng thái kết hợp trong trường hợp đang khảo sát còn được gọi là trạng thái ngưng tụ exciton, tương tự như trạng thái ngưng tụ của cặp Cooper trong lý thuyết siêu dẫn. Ở trường hợp $H^z=0$ ta

thấy tất cả các giá trị của $|\Delta_{\sigma\sigma'}|$ đều như nhau, không phụ thuộc vào spin của hạt tải. Điều đó thể hiện khi hệ không nằm trong từ trường, bức tranh ngưng tụ của exciton không phụ thuộc vào spin của điện tử hay lỗ trống. Đây là lý do mà hầu hết các nghiên cứu về trạng thái ngưng tụ của exciton khi không có từ trường đều không quan tâm tới spin của hạt tải, và xem hệ như không spin. Tuy nhiên, khi $H^z \neq 0$, các $|\Delta_{\sigma\sigma'}|$ khác nhau với $|\Delta_{\uparrow\uparrow}| = |\Delta_{\downarrow\downarrow}|$. Cụ thể, khi tăng H^z với $H^z < 0.5$, ta thấy $|\Delta_{\uparrow\uparrow}|$ và $|\Delta_{\downarrow\downarrow}|$ giảm, còn $|\Delta_{\downarrow\uparrow}|$ và $|\Delta_{\uparrow\downarrow}|$ lại tăng. Tuy nhiên, sự thay đổi của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton vào từ trường lại tùy thuộc vào hướng spin của mỗi hạt tải. Nếu như cả $|\Delta_{\uparrow\uparrow}|$ và $|\Delta_{\downarrow\downarrow}|$ đều giảm về 0 ở một giới hạn H_1^z thì ngược lại $|\Delta_{\downarrow\uparrow}|$ và $|\Delta_{\uparrow\downarrow}|$ tăng tới giá trị cực đại, sau đó giảm dần về 0 ở một giới hạn H_2^z rất lớn so với H_1^z . Điều này tạo nên một bức tranh thú vị về trạng thái ngưng tụ của exciton khi có mặt của từ trường.



Hình 2. Các năng lượng giả hạt ứng với mỗi hướng spin phụ thuộc xung lượng theo hướng đường chéo chính $k = k_x = k_y$ trong vùng Brillouin thứ nhất ứng với mỗi giá trị khác nhau của cường độ từ trường H^z .

Sự khác nhau về giá trị tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton tùy thuộc vào hướng spin của hạt tải khi từ trường $H^z > 0$ ở Hình 1 có thể được giải thích thông qua khảo sát bức tranh năng lượng giả hạt của hệ tương ứng với các giá trị khác nhau của từ trường ngoài như ở Hình 2. Thực vậy, khi không có từ trường, Hình 2(a) cho ta thấy các mức năng lượng giả hạt của điện tử dẫn và của điện tử hóa trị hoàn toàn suy biến theo hướng spin. Đây chính là bức tranh trạng thái ngưng tụ exciton khi không tính tới spin của hạt tải. Tuy nhiên, khi có mặt của từ trường các mức năng lượng của điện tử trên dải dẫn và điện tử trên dải hóa trị bị tách ra [xem Hình 2(b-d)]. Với từ trường ngoài theo phương z hướng lên trên thì mức năng lượng của điện tử với spin hướng lên sẽ bị dịch chuyển xuống một khoảng tỉ lệ với từ trường ngoài, còn ngược lại mức năng lượng của điện tử với spin hướng xuống sẽ bị dịch chuyển lên một khoảng tỉ lệ với H^z . Điều này cho thấy, khi từ trường ngoài còn nhỏ, sự xen phủ của tất cả các mức năng lượng vẫn xảy ra tại gần mức Fermi, kết quả ta vẫn quan sát được tất cả các

ghép cặp có thể của các điện tử ở dải dẫn và điện tử ở dải hóa trị với các hướng spin khác nhau [Hình 2(b)]. Tuy nhiên, lúc này việc ghép cặp trở nên ưu tiên với các hạt tải có hướng spin trái chiều so với các cặp hạt tải với spin cùng chiều. Điều này càng trở nên rõ ràng khi tăng cường độ từ trường. Khi từ trường đủ lớn, $H^z \geq H_1^z$, sự xen phủ của các dải năng lượng ứng với cặp điện tử có spin cùng chiều xảy ra ở mức năng lượng xa mức Fermi vì vậy chúng không đóng góp cho ghép cặp và $|\Delta_{\uparrow\uparrow}| = |\Delta_{\downarrow\downarrow}| = 0$. Lúc này chỉ còn sự xen phủ của các dải năng lượng ứng với spin trái chiều xảy ra tại mức Fermi [Hình 2(c)]. Tuy nhiên, càng tăng từ trường ngoài thì các mức năng lượng xen phủ nhau càng giảm và vì vậy tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton giảm và nó về 0 khi từ trường ngoài $H^z \geq H_2^z$. Khi $H^z \geq H_2^z$, từ trường đủ lớn làm dịch chuyển các mức năng lượng làm cho ngay cả mức năng lượng của điện tử dẫn với spin hướng lên bị dịch chuyển xuống và mức năng lượng của điện tử hóa trị với spin hướng xuống bị dịch chuyển lên tới mức không gặp nhau ở mức Fermi nữa [Hình

2(d)]. Khi đó, hệ không còn tồn tại trạng thái ngưng tụ exciton.

4. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã khảo sát bức tranh trạng thái ngưng tụ của exciton trong các hệ bán kim loại khi có mặt của từ trường ngoài. Bằng sử dụng mô hình Falicov–Kimball mở rộng khi có mặt của từ trường, chúng tôi đã thu được lời giải tự hợp cho tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton trong gần đúng Hartree-Fock. Kết quả tính số khẳng định vai trò quan trọng của từ trường ngoài quyết định sự tồn tại của trạng thái ngưng tụ exciton. Hơn nữa, với sự có mặt của từ trường, spin của hạt tải trở nên quan trọng và tùy thuộc vào spin của điện tử trên dải dẫn và điện tử trên dải hóa trị mà chúng tôi quan sát được những tình huống khác nhau của quá trình ghép cặp hình thành trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ. Kết quả của bài báo đóng vai trò quan trọng trong việc hiểu biết sâu sắc hơn bức tranh trạng thái ngưng tụ exciton trong hệ đặc biệt khi có mặt của từ trường, là cơ sở để chúng tôi khảo sát tính chất tô-pô của trạng thái ngưng tụ exciton.

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

- [1] Mott N. F. (1961). “The transition to the metallic state”. *Philos. Mag.* 6, 287.
- [2] Knox R. (1963). *Solid State Physics*. New York: Academic.
- [3] Kaneko T., Ohta Y. (2024). “A New Era of Excitonic Insulators”. *arXiv:2411.10985v1 [cond-mat.str-el]*.
- [4] Bardeen J., Cooper L. N., Schrieffer J. R. (1957). “Theory of Superconductivity”. *Phys. Rev.* 108, 1175.
- [5] Ihle D., Pfafferoth M., Burovski E., Bronold F. X., Fehske H. (2008). “Bound state formation and nature of the excitonic insulator phase in the extended Falicov-Kimball model”. *Phys. Rev. B* 78, 193103.
- [6] Phan N. V., Fehske H., Becker K. W. (2011). “Excitonic resonances in the 2D extended Falicov-Kimball model”. *Europhys. Lett.* 95, 17006.
- [7] Zenker B., Ihle D., Bronold F. X., Fehske H. (2010). “On the existence of the excitonic insulator phase in the extended Falicov-Kimball model: A SO (2)-invariant slave-boson approach”. *Phys. Rev. B* 81, 115122.
- [8] Hải Đ.T.H., Nhâm P.V. (2018). “Tính chất hàm phổ trong mô hình Falicov-Kimball mở rộng có tương tác điện tử – phonon: Sự hình thành trạng thái điện môi exciton”. *Tạp chí Khoa học và Công nghệ Đại học Duy Tân* 6 (31), 89.
- [9] Hải Đ.T.H., Nhâm P.V. (2018). “Giản đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton trong mô hình Falicov-Kimball mở rộng có tương tác điện tử – phonon”. *Tạp chí Khoa học và Công nghệ Đại học Duy Tân* 6 (31), 95.