



Nghiên cứu ảnh hưởng của thể tương tác Coulomb và sự mất cân bằng khối lượng lên các trạng thái ngưng tụ exciton-polariton

Investigating the impacts of Coulomb interaction and mass imbalance on exciton-polariton condensation states

Đỗ Thị Hồng Hải^a, Nguyễn Thị Hậu^{a,b}, Phan Văn Nhâm^{c,d*}

Do Thi Hong Hai^a, Nguyen Thi Hau^{a,b}, Phan Van Nham^{c,d*}

^aTrường Đại học Mở - Địa chất, Đông Ngạc, Hà Nội, Việt Nam

^aHanoi University of Mining and Geology, Dong Ngac, Hanoi, Vietnam

^bHọc viện Khoa học và công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam, Hà Nội, Việt Nam

^bGraduate University of Science and Technology, Vietnam Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

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

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

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

^dFaculty of Environmental and Natural Sciences, School of Engineering and Technology, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Vietnam

(Ngày nhận bài: 27/03/2025, ngày phản biện xong: 15/05/2025, ngày chấp nhận đăng: 23/06/2025)

Tóm tắt

Trong bài báo này, chúng tôi mô tả ảnh hưởng của thể tương tác Coulomb lên trạng thái ngưng tụ của exciton, polariton và photon trong vi hốc bán dẫn mất cân bằng khối lượng ở nhiệt độ $T=0$. Bằng cách áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn cho mô hình hai dải năng lượng có tương tác exciton - photon và lực hút Coulomb giữa điện tử và lỗ trống, hệ phương trình tự hợp xác định các tham số trật tự trạng thái ngưng tụ được xác định. Sự cạnh tranh giữa các tham số trật tự thể hiện cấu trúc trạng thái ngưng tụ phức tạp trong hệ khi thay đổi cường độ tương tác Coulomb. Khi giảm sự khác biệt giữa khối lượng của điện tử và lỗ trống, các tham số trật tự tăng thể hiện sự ổn định của hệ trong các trạng thái ngưng tụ. Sự phụ thuộc vào xung lượng của biên độ lai hóa cặp điện tử-lỗ trống và mật độ photon khẳng định trạng thái ngưng tụ dạng BEC của hệ.

Từ khóa: ngưng tụ exciton-polariton; vi hốc bán dẫn; mất cân bằng khối lượng.

Abstract

In the present paper, we address the impacts of the Coulomb interaction on the condensation state of excitons, polaritons and photons in mass imbalance semiconductor microcavities at zero temperature. Adapting the unrestricted Hartree-Fock approximation to the two-band model involving exciton-photon coupling and electron-hole Coulomb attraction, a set of self-consistent equations determining the condensation state order parameters is established. The competition between the condensate order parameters delivers a complex condensate structure in the system once the Coulomb interaction is varied. Reducing the mass imbalance reinforces the order parameters, specifying the stability of the condensation states. The electron-hole amplitude and the photonic density momentum distributions attribute the BEC type of the condensates.

Keywords: exciton-polariton condensation; semiconductor microcavity; the mass imbalance.

*Tác giả liên hệ: Phan Văn Nhâm

Email: phanvannham@duytan.edu.vn

Nội dung

1. Đặt vấn đề

Ngưng tụ Bose-Einstein (BEC) là trạng thái lượng tử kết hợp của các hạt hoặc giả hạt boson trong chất rắn khi được làm lạnh đến nhiệt độ đủ thấp. Đây luôn là một trong những vấn đề hấp dẫn thu hút sự quan tâm nghiên cứu của các nhà khoa học cả trong lý thuyết lẫn thực nghiệm trên toàn thế giới. Nhiệt độ tới hạn cho chuyển pha trạng thái BEC tỉ lệ nghịch với khối lượng hiệu dụng của hạt. Chính vì vậy, để quan sát được trạng thái BEC trong các hệ thực, cần thiết lập hệ hạt boson có thời gian sống đủ dài và khối lượng hiệu dụng đủ nhỏ. Theo các tiên đoán lý thuyết, trong các vật liệu bán kim loại hay bán dẫn khe hẹp, giả hạt boson exciton được tạo thành do lực hút tĩnh điện Coulomb kết cặp điện tử ở dải dẫn với lỗ trống ở dải hóa trị [1]. Đặc biệt, khi exciton kết cặp với photon trong cấu trúc vi hốc sẽ tạo thành một giả hạt boson mới là polariton có khối lượng hiệu dụng rất nhỏ (cỡ 10^{-5} khối lượng của điện tử tự do) và thời gian sống đủ dài (270ps ở trạng thái cân bằng) [2]. Điều này mở ra hi vọng có thể quan sát được trạng thái BEC của polariton ngay cả ở nhiệt độ phòng đồng thời mở ra khả năng ứng dụng rất lớn trong công nghệ hiện đại. Tuy nhiên, cho đến nay, những quan sát thực nghiệm về trạng thái ngưng tụ polariton vẫn còn hạn chế. Do đó, nghiên cứu chi tiết bản chất của trạng thái ngưng tụ polariton và khả năng xảy ra chuyển pha trạng thái ngưng tụ luôn được quan tâm trong những năm gần đây.

Một trong những yếu tố quan trọng ảnh hưởng đến sự hình thành exciton và do đó là hình thành polariton trong vi hốc bán dẫn là sự chênh lệch khối lượng hiệu dụng của điện tử dải dẫn và lỗ trống dải hóa trị [3]. Thật vậy, các nghiên cứu đã khẳng định mối tương quan về khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống trên một số loại vật liệu khác nhau là khác nhau. Chẳng hạn như, trong bán dẫn CdTe, GsAs hay GaN, khối lượng

hiệu dụng của lỗ trống thường lớn hơn khối lượng hiệu dụng của điện tử [4-7], còn trong các hệ TMD đơn lớp, khối lượng của điện tử và lỗ trống gần như bằng nhau [8, 9]. Gần đây đã có một số nghiên cứu được thực hiện về ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng giữa điện tử và lỗ trống lên sự hình thành các trạng thái ngưng tụ trong vật liệu bán kim loại, bán dẫn [10-14] hay trong cấu trúc vi hốc [15-17]. Những nghiên cứu này đã khẳng định vai trò quan trọng của mất cân bằng khối lượng trong quá trình kết cặp điện tử - lỗ trống hình thành exciton và trạng thái ngưng tụ.

Trong bài báo này, chúng tôi tập trung khảo sát ảnh hưởng của thế tương tác Coulomb lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ của exciton, polariton và photon trong vi hốc bán dẫn mất cân bằng khối lượng ở trạng thái cơ bản. Để có thể mô tả hệ exciton-polariton-photon một cách thực tế nhất, chúng tôi sử dụng mô hình hai dải năng lượng có cả tương tác điện tử - photon và tương tác Coulomb điện tử - lỗ trống. Trong khuôn khổ gần đúng Hartree-Fock không giới hạn, một hệ các phương trình tự hợp cho phép xác định các tham số trật tự trạng thái ngưng tụ được rút ra khi vai trò của tương tác điện tử - photon và tương tác Coulomb được xem xét tương đương nhau. Từ kết quả tính số giải hệ phương trình tự hợp, các giản đồ pha biểu thị sự phụ thuộc của các tham số trật tự vào thế tương tác Coulomb và sự mất cân bằng khối lượng được thiết lập.

Bài báo được chia thành 4 phần. Trong đó ở phần 2, chúng tôi trình bày các tính toán giải tích áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn để giải Hamiltonian của mô hình rút ra hệ phương trình tự hợp xác định các tham số trật tự trạng thái ngưng tụ. Trên cơ sở các kết quả giải tích tìm được, chương trình tính số được thiết lập và các giản đồ pha nhận được từ các kết quả tính số cùng các thảo luận được trình bày trong phần 3. Phần cuối cùng là kết luận của bài báo.

2. Mô hình và tính toán giải tích

Hệ exciton-polariton trong vi hốc bán dẫn được mô tả bởi Hamiltonian gồm hai phần

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad (1)$$

trong đó, số hạng thứ nhất mô tả phần không tương tác của hệ được viết trong không gian xung lượng như sau

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}}^e e_{\mathbf{k}}^\dagger e_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^h h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \psi_{\mathbf{q}}^\dagger \psi_{\mathbf{q}} \quad (2)$$

với $t^{e/h}$ là tích phân nhảy nút của điện tử/lỗ trống thể hiện mối tương quan về khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống trong hệ, E_g là khe năng lượng thể hiện khoảng cách từ đáy của dải dẫn tới đỉnh của dải hóa trị, hệ sẽ được thiết

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle \psi_{\mathbf{q}}^\dagger \psi_{\mathbf{q}} \rangle + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} (\langle e_{\mathbf{k}}^\dagger e_{\mathbf{k}} \rangle + \langle h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}} \rangle). \quad (5)$$

Số hạng thứ hai $\mathcal{H}_1$ trong Hamiltonian (1) mô tả phần tương tác Coulomb giữa các điện tử - lỗ

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_1}^\dagger e_{\mathbf{k}_1} h_{-\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}^\dagger h_{\mathbf{k}_2} - \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}}^\dagger \psi_{\mathbf{q}} + H.c) \quad (6)$$

với U là cường độ thế tương tác Coulomb và g là hằng số tương tác điện tử/lỗ trống - photon. Ảnh hưởng của phần tương tác điện tử/lỗ trống - photon trong công thức (6) lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ của exciton-polariton phụ thuộc vào sự xen phủ của dải năng lượng điện tử/lỗ trống với dải năng lượng photon. Do đó, hệ exciton-polariton sẽ được mô tả một cách thuận lợi bằng việc đưa vào tham số điều chỉnh $\delta = \omega_0 - E_g$. Nếu δ lớn, dải năng lượng photon xen phủ mạnh với các dải năng lượng điện tử/lỗ trống và vì vậy sự đóng góp của photon vào sự ngưng tụ của exciton-polariton là ít quan trọng. Còn khi δ nhỏ, dải năng lượng điện tử/lỗ trống gần đáy dải năng lượng photon thì đóng góp của

với $e_{\mathbf{k}}(e_{\mathbf{k}}^\dagger)$, $h_{\mathbf{k}}(h_{\mathbf{k}}^\dagger)$ và $\psi_{\mathbf{q}}(\psi_{\mathbf{q}}^\dagger)$ lần lượt là toán tử hủy (sinh) của điện tử e trên dải dẫn, lỗ trống h trên dải hóa trị mang xung lượng $\mathbf{k}$ và photon mang xung lượng $\mathbf{q}$ có năng lượng tán sắc $\omega_{\mathbf{q}}$ phụ thuộc xung lượng được cho bởi

$$\omega_{\mathbf{q}} = \sqrt{(c\mathbf{q})^2 + \omega_0^2} - \mu \quad (3)$$

với ω_0 là năng lượng của photon tại xung lượng $\mathbf{q} = 0$ và c là vận tốc ánh sáng trong vi hốc. Năng lượng tán sắc của điện tử và lỗ trống trong hệ hai chiều được cho bởi

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{e/h} = -2t^{e/h}(\cos k_x + \cos k_y) + \frac{E_g + 8t^{e/h} - \mu}{2} \quad (4)$$

lập ở trạng thái bán kim loại với $E_g < 0$ còn trạng thái bán dẫn với $E_g > 0$, μ là thế hóa học được lựa chọn để điều khiển tổng mật độ kích thích n với N là số nút mạng trong giếng lượng tử

trống và tương tác điện tử/lỗ trống - photon được viết dưới dạng

photon là quan trọng, do đó làm tăng cường sự ngưng tụ của các photon.

Bỏ qua các số hạng vô cùng bé và các hằng số trong gần đúng Hartree-Fock không giới hạn, ta nhận được Hamiltonian mới gồm hai phần là phần điện tử và phần photon. Hamiltonian cần được viết dưới dạng toàn phương của các toán tử sinh và hủy tức là cần được chéo hóa hoàn toàn để có thể tính được các giá trị kì vọng. Sử dụng phép biến đổi Bogoliubov định nghĩa các toán tử giả hạt fermion mới để chéo hóa phần điện tử

$$\begin{aligned} a_{1\mathbf{k}}^\dagger &= u_{\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}} h_{-\mathbf{k}} \\ a_{2\mathbf{k}}^\dagger &= -v_{\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} h_{-\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (7)$$

với $u_{\mathbf{k}}$ và $v_{\mathbf{k}}$ được chọn sao cho $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$. Bên cạnh đó, chúng tôi định nghĩa toán tử photon mới để chéo hóa phần photon

$$\Psi_{\mathbf{q}}^{\dagger} = \psi_{\mathbf{q}}^{\dagger} - \frac{g}{\sqrt{N}} \frac{\sum_{\mathbf{k}} \langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle}{\omega_{\mathbf{q}=0}} \delta_{\mathbf{q},0} \quad (8)$$

Hamiltonian cuối cùng chéo hóa hoàn toàn được viết dưới dạng sau

$$\mathcal{H}_{Dia} = \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}}^{+} a_{1\mathbf{k}}^{\dagger} a_{1\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}^{-} a_{2\mathbf{k}}^{\dagger} a_{2\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \Psi_{\mathbf{q}}^{\dagger} \Psi_{\mathbf{q}} \quad (9)$$

trong đó

$$E_{\mathbf{k}}^{+/-} = \frac{1}{2} [E_{\mathbf{k}}^h - E_{\mathbf{k}}^e \pm \text{sgn}(E_{\mathbf{k}}^h + E_{\mathbf{k}}^e) \Gamma_{\mathbf{k}}] \quad (10)$$

là các năng lượng giả hạt fermion với $E_{\mathbf{k}}^{h/e}$ là năng lượng tán sắc tái chuẩn hóa của các điện tử và lỗ trống khi có dịch chuyển Hartree

$$E_{\mathbf{k}}^{h/e} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{h/e} - U n^{e/h} \quad (11)$$

ở đây, $n^{\varphi} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \varphi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \varphi_{\mathbf{k}} \rangle$ là mật độ điện tử với $\varphi \equiv e$ và mật độ lỗ trống với $\varphi \equiv h$.

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = \sqrt{(E_{\mathbf{k}}^h + E_{\mathbf{k}}^e)^2 + 4|\Delta|^2} \quad (12)$$

$$\Delta = -\frac{g^2}{N\omega_{\mathbf{q}=0}} \sum_{\mathbf{k}} \langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle \quad (13)$$

Δ trong công thức trên có chứa số hạng $d_{\mathbf{k}}^{exc} = \langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle$ biểu thị sự lai hóa điện tử - lỗ trống nên Δ được xem như tham số trật tự mô tả trạng thái ngưng tụ exciton-polariton trong hệ. Hệ sẽ tồn tại trong trạng thái ngưng tụ được đặc trưng bởi giá trị khác không của tham số trật tự. Để thấy rõ đặc tính của trạng thái ngưng tụ exciton-polariton trong hệ, chúng ta tách tham số trật tự trong công thức (13) thành hai phần:

$\Delta = \Delta_{ph} + \Delta_{exc}$ với $\Delta_{exc} = -\frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{exc}$ là

tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton và $\Delta_{ph} = -\frac{g^2}{N\omega_{\mathbf{q}=0}} \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{exc}$ là tham số trật tự trạng thái ngưng tụ photon. Tùy thuộc vào sự cạnh tranh giữa hai tham số trật tự này mà hệ có thể tồn tại ở trạng thái ngưng tụ exciton, polariton hay photon.

Từ Hamiltonian chéo hóa ở phương trình (9) chúng ta xác định được

$$d_{\mathbf{k}}^{exc} = [n^F(E_{\mathbf{k}}^{+}) - n^F(E_{\mathbf{k}}^{-})] \frac{\text{sgn}(E_{\mathbf{k}}^h + E_{\mathbf{k}}^e) \cdot \Delta}{\Gamma_{\mathbf{k}}} \quad (14)$$

trong đó $n^F(\epsilon) = (1 + e^{\epsilon/T})^{-1}$ là hàm phân bố Fermi-Dirac với T là nhiệt độ tuyệt đối. Từ đây ta có thể xác định được các tham số trật tự trạng thái ngưng tụ.

Tương tự, ta cũng xác định được mật độ photon theo xung lượng từ Hamiltonian chéo hóa (9):

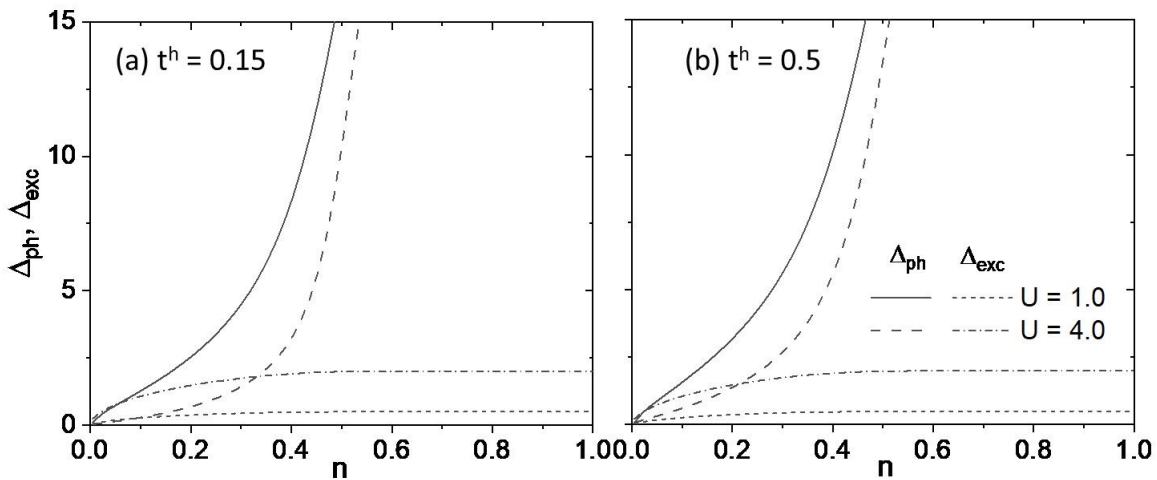
$$n_{\mathbf{q}}^{ph} = \langle \psi_{\mathbf{q}}^{\dagger} \psi_{\mathbf{q}} \rangle = n^{BE}(\omega_{\mathbf{q}}) + \frac{1}{N} \left(\frac{g \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{exc}}{\omega_0} \right)^2 \delta_{\mathbf{q},0} \quad (15)$$

với $n^{BE}(\epsilon) = (e^{\epsilon/T} - 1)^{-1}$ là hàm phân bố Bose-Einstein.

3. Kết quả tính số và thảo luận

Trong phần này, chúng tôi trình bày các kết quả nhận được từ chương trình tính số giải tự hợp các phương trình (11)-(14) cho hệ hai chiều gồm $N = 200 \times 200$ nút mạng để nhận được giá trị cụ thể của các tham số trật tự Δ_{exc} và Δ_{ph} . Ở đây, chúng tôi chọn $t^e = 1$ là đơn vị của năng lượng và chọn năng lượng photon xung lượng

không $\omega_0 = 0.8$; hằng số tương tác điện tử/lỗ trống - photon $g = 0.2$. Với sự lựa chọn $t^e = 1$ thì giá trị của tích phân nhảy nút của lỗ trống t^h sẽ thể hiện mối tương quan về khối lượng của điện tử và lỗ trống trong hệ. Trong nghiên cứu này, chúng tôi lựa chọn tham số điều chỉnh $\delta = -1.0 < 0$, khi đó $E_g > 0$ để phù hợp với hệ exciton-polariton trong vi hốc bán dẫn.



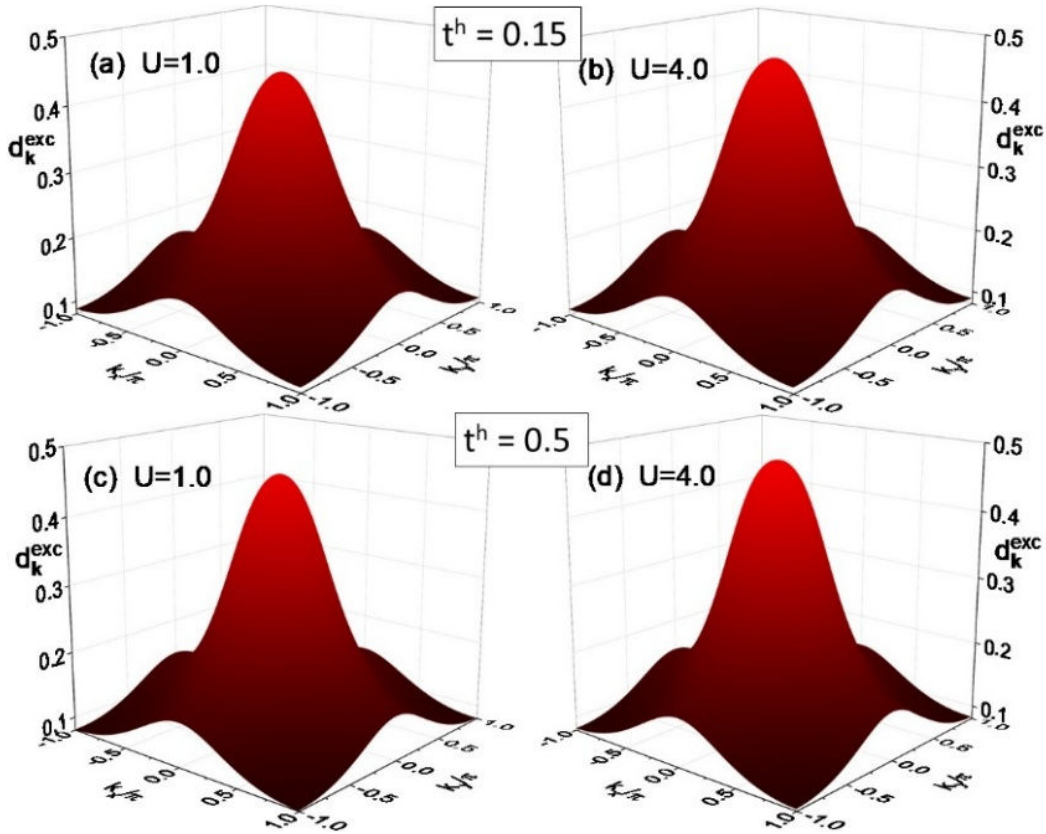
Hình 1. Tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton Δ_{exc} và photon Δ_{ph} theo mật độ kích thích n ứng với hai giá trị khác nhau của cường độ thể tương tác Coulomb U khi $t^h = 0.15$ (Hình a) và $t^h = 0.5$ (Hình b).

Để phân tích ảnh hưởng của thể tương tác Coulomb U và tổng mật độ kích thích n lên sự hình thành các trạng thái ngưng tụ trong hệ, chúng tôi biểu thị trên Hình 1 sự phụ thuộc của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton Δ_{exc} và tham số trật tự trạng thái ngưng tụ photon Δ_{ph} theo mật độ kích thích n khi thay đổi cường độ tương tác Coulomb tại nhiệt độ không. Hình 1 cho thấy, tại một giá trị xác định của thể tương tác Coulomb, cả tham số trật tự exciton và tham số trật tự photon đều khác không chỉ khi giá trị của mật độ kích thích hữu hạn. Tăng dần mật độ kích thích, cả hai tham số trật tự đều tăng thể hiện sự ổn định của các trạng thái ngưng tụ trong hệ. Khi tăng cường độ tương tác Coulomb, tại mật độ kích thích xác định, tham số trật tự phonon Δ_{ph} giảm trong khi tham số trật tự exciton Δ_{exc} tăng. Điều này thể hiện vai trò quan trọng của cường độ tương tác Coulomb trong

việc hình thành trạng thái ngưng tụ của hệ. Thật vậy, exciton được tạo thành do sự kết cặp của điện tử và lỗ trống nhờ tương tác Coulomb. Do đó, tương tác Coulomb tăng sẽ tăng cường khả năng kết cặp điện tử - lỗ trống hình thành exciton liên kết chặt nhờ đó dễ dàng thiết lập trạng thái ngưng tụ exciton được thể hiện bởi sự tăng lên của tham số trật tự exciton Δ_{exc} . Tuy nhiên, việc tăng U cũng làm cho thể hóa càng xa đáy của dải photon tương ứng với việc làm giảm giá trị của Δ_{ph} . Sự thay đổi trái ngược của hai tham số trật tự Δ_{exc} và Δ_{ph} khi tăng U từ giới hạn tương tác yếu ($U = 1.0 \sim t^{e/h}$) sang giới hạn tương tác mạnh ($U = 4.0 \gg t^{e/h}$) cũng thể hiện cấu trúc pha phức tạp trong hệ. Trên Hình 1a, chúng tôi lựa chọn $t^h = 0.15$ để phù hợp với hệ điện tử-lỗ trống trong vi hốc bán dẫn GaAs [5,6]. Giảm đồ cho thấy, trong trường hợp tương tác yếu ($U = 1.0$), khi mật độ kích thích nhỏ ($n < 0.06$), tỉ số

$\Delta_{ph}/\Delta \approx 70\% \div 80\%$ hệ vì vậy tồn tại trong trạng thái ngưng tụ polariton. Khi mật độ kích thích tăng, tham số trật tự photon tăng nhanh làm cho tỉ số $\Delta_{ph}/\Delta > 80\%$, hệ ở trạng thái ngưng tụ photon-polariton. Trong khi đó, tăng U đến giới hạn tương tác mạnh ($U = 4.0$), cấu trúc pha phức tạp xuất hiện trong hệ. Ở mật độ kích thích nhỏ ($n < 0.1$) hệ tồn tại ở trạng thái ngưng tụ exciton-polariton với tỉ số $\Delta_{ph}/\Delta \leq 20\%$, còn khi mật độ kích thích lớn ($n > 0.48$) hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ photon-polariton. Trong giới hạn mật độ kích thích trung bình ($0.1 \leq n \leq 0.48$), hệ ở trạng thái ngưng tụ polariton. Tăng tích phân nhảy nút tới $t^h = 0.5$ tương đương với hệ bán dẫn CdTe [4], Hình 1b cho

thấy sự tăng đáng kể của Δ_{ph} và do đó cấu trúc pha ngưng tụ của hệ cũng thay đổi, giá trị tới hạn của mật độ kích thích cho sự tồn tại của hệ trong trạng thái ngưng tụ polariton giảm. Với tương tác Coulomb nhỏ, hệ chỉ tồn tại trong pha ngưng tụ photon-polariton, trong khi ở tương tác Coulomb mạnh, trong hệ có thể xuất hiện cả pha ngưng tụ polariton và photon-polariton. Thực vậy, khi t^h lớn hơn hay khối lượng hiệu dụng của lỗ trống giảm và có thể so sánh với khối lượng hiệu dụng của điện tử, các lỗ trống linh hoạt hơn và dải lỗ trống có thể dễ dàng chạm đến đáy của dải photon. Khi đó các photon sẽ thay thế các exciton ngưng tụ để giảm thiểu năng lượng toàn phần.



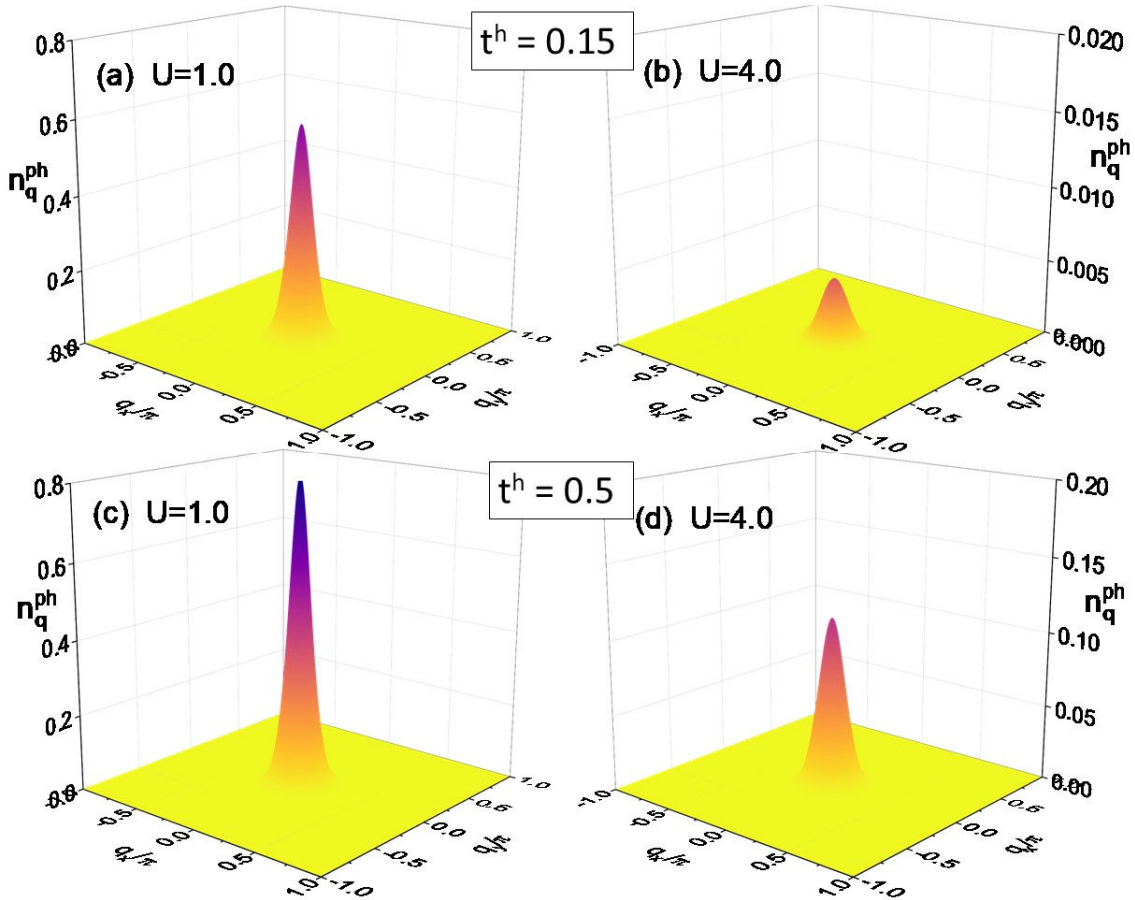
Hình 2. Biên độ lai hóa d_k^{exc} phụ thuộc vào xung lượng $\mathbf{k}$ trong vùng Brillouin thứ nhất khi thay đổi thể tương tác Coulomb U và tích phân nhảy nút t^h tại $n = 0.05$.

Tiếp theo, chúng tôi thảo luận chi tiết ảnh hưởng của thể tương tác Coulomb U và sự mất cân bằng khối lượng lên bản chất trạng thái ngưng tụ của hệ bằng việc khảo sát phân bố xung lượng của biên độ lai hóa cặp điện tử - lỗ trống d_k^{exc} và mật độ photon n_q^{ph} với mật độ kích thích

$n = 0.05$. Hình 2 cho thấy d_k^{exc} luôn khác không tại xung lượng xác định thể hiện trạng thái lai hóa của điện tử - lỗ trống để ổn định trạng thái ngưng tụ exciton. Trong mọi trường hợp, ta luôn tìm thấy giá trị cực đại của d_k^{exc} tại xung lượng $\mathbf{k} = 0$ thể hiện exciton ngưng tụ trong trạng thái

BEC. Điều này phù hợp với giả thiết khi hệ ở trạng thái bán dẫn tương ứng với khe năng lượng E_g dương. Khi tăng U hay tăng t^h , khả năng kết cặp của điện tử và lỗ trống tăng lên và do đó dễ dàng hình thành trạng thái ngưng tụ exciton được thể hiện bởi sự tăng giá trị của biên độ lai

hóa exciton d_k^{exc} . Tại một giá trị xác định của thể tương tác Coulomb U , khi t^h tăng tới giá trị đủ lớn, lai hóa điện tử - lỗ trống có thể chạm tới đáy của dải kích thích photon và do đó mật độ photon n_q^{ph} được tăng cường mạnh mẽ cũng được thể hiện trên Hình 3.



Hình 3. Mật độ photon n_q^{ph} phụ thuộc vào xung lượng $\mathbf{q}$ trong vùng Brillouin thứ nhất khi thay đổi thể tương tác Coulomb U và tích phân nhảy nút t^h tại $n = 0.05$.

Hình 3 cho thấy, n_q^{ph} luôn đạt cực đại tại xung lượng không tương tự như d_k^{exc} thể hiện sự ngưng tụ của photon trong trạng thái BEC. So sánh Hình 3a với 3b và Hình 3c với 3d ta thấy tăng U làm cho thể hóa càng xa đáy của dải photon tương ứng với việc làm giảm đáng kể giá trị của n_q^{ph} . Tăng U cũng thúc đẩy trạng thái liên kết điện tử - lỗ trống làm cho d_k^{exc} tăng và exciton chiếm ưu thế hơn photon, hệ do đó ổn định trong trạng thái ngưng tụ exciton-polariton dạng BEC khi U lớn (so sánh Hình 2b, 3b). Ngược lại, tại U xác định và tăng tích phân nhảy nút tức là lỗ trống nhẹ hơn, linh động hơn, việc

cố định mật độ kích thích toàn phần sẽ làm cho kích thích điện tử - lỗ trống đạt tới kích thích của dải photon và do đó các polariton được tạo thành. Cường độ đỉnh của cả biên độ lai hóa d_k^{exc} và mật độ photon n_q^{ph} tại xung lượng không đều tăng lên (xem Hình 2 a,c và Hình 3 a,c) thể hiện hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ polariton dạng BEC.

4. Kết luận

Như vậy, bằng cách áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn cho mô hình hai dải năng lượng có tương tác điện tử - photon và

tương tác Coulomb, bức tranh trạng thái ngưng tụ trong cấu trúc quang vi hốc đã được khảo sát. Các kết quả tính số thể hiện vai trò quan trọng của thể tương tác Coulomb và mất cân bằng khối lượng trong sự hình thành và bản chất trạng thái ngưng tụ exciton-polariton-photon trong hệ. Các kết quả cho thấy sự thay đổi trái ngược của tham số trật tự exciton và photon khi tăng thể tương tác Coulomb từ giới hạn tương tác yếu sang giới hạn tương tác mạnh. Trong trường hợp tương tác yếu, khi mất cân bằng khối lượng nhỏ, hệ chỉ tồn tại trong trạng thái ngưng tụ photon-polariton, còn khi mất cân bằng khối lượng lớn và mật độ kích thích đủ nhỏ, hệ có thể tồn tại trong trạng thái ngưng tụ polariton. Trong khi đó, ở giới hạn tương tác mạnh, cấu trúc pha phức tạp hơn với sự xuất hiện của cả ba trạng thái ngưng tụ exciton-polariton, polariton và photon-polariton khi mất cân bằng khối lượng lớn. Giảm đồ biểu thị sự phụ thuộc vào xung lượng của biên độ lai hóa cặp điện tử-lỗ trống và mật độ photon khẳng định hệ ngưng tụ trong trạng thái BEC polariton. Khi giảm mất cân bằng khối lượng, cường độ đỉnh của cả biên độ lai hóa exciton và mật độ photon tại xung lượng không đều tăng lên thể hiện sự ổn định trong trạng thái ngưng tụ của hệ. Trong khi đó, khi tăng cường độ thể tương tác Coulomb, mật độ photon giảm đáng kể và do đó hệ có thể ưu tiên tồn tại trong trạng thái ngưng tụ exciton-polariton nếu tương tác Coulomb đủ lớn.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Mở - Địa chất trong đề tài mã số T25-19.

Tài liệu tham khảo

- [1] M. P. Marder. (1999). *Condensed Matter Physics*. John Wiley & Sons, New Jersey.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] T. D. Doan, H. T. Cao, and D. B. T. Thoai. (2006). Microcavity polariton kinetics for bosonic condensation and lasing in II-VI compound materials. *Phys. Rev. B* 74. 115316.
- [5] W. Nakwaski. (1995). Effective Masses of Electrons and Heavy Holes in GaAs, InAs, AlAs and Their Ternary Compounds. *Physica B: Condens. Mat.* 210. 1.
- [6] S. Pau, G. Bjork, J. Jacobson, H. Cao, and Y. Yamamoto. (1995). Stimulated emission of a microcavity dressed exciton and suppression of phonon scattering. *Phys. Rev. B* 51. 7090.
- [7] M. Suzuki and T. Uenoyama. (1995). First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN. *Phys. Rev. B* 52. 8132.
- [8] Kormanyos, G. Burkard, M. Gmitra, J. Fabian, V. Zolyomi, N. D. Drummond, and V. Falko. (2015). k-p theory for two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors. *2D Materials* 2. 022001.
- [9] J. Chang and S. Banerjee. (2014). Ballistic performance comparison of monolayer transition metal dichalcogenide MX₂ (M = Mo, W; X = S, Se, Te) metal-oxide-semiconductor field effect transistors. *J. Appl. Phys.* 115. 084506.
- [10] P. Farkasovsky. (2017). Formation and condensation of excitonic bound states in the generalized Falicov-Kimball model. *Phys. Rev. B* 95. 045101.
- [11] P. Farkasovsky. (2020). DMRG study of exciton condensation in the extended Falicov-Kimball model. *Condens. Matter Phys.* 23. 43709.
- [12] T.-H.-H. Do and V.-N. Phan. (2023). Electron-phonon correlations inducing excitonic excitations in semimetal and semiconducting materials. *Phys. Rev. B* 107. 115106.
- [13] T.-H.-H. Do, T.-H. Nguyen, and V.-N. Phan. (2024). Mass imbalance and electron-phonon correlation impact on the excitonic insulator state in semimetal/semiconducting materials. *Phys. Rev. B* 109. 085105.
- [14] T.-H.-H. Do and V.-N. Phan. (2024). Thermal fluctuations and mass imbalance in low-energy excitonic condensate excitations. *Phys. Rev. B* 110. 235143.
- [15] G. Li, M. M. Parish, and J. Levinsen. (2021). Microscopic calculation of polariton scattering in semiconductor microcavities. *Phys. Rev. B* 104. 245404.
- [16] Tiene, J. Levinsen, M. M. Parish, A. H. MacDonald, J. Keeling, and F. M. Marchetti. (2020). Extremely imbalanced two-dimensional electron-hole-photon systems. *Phys. Rev. Res.* 2. 023089.
- [17] Tiene. (2023). Charged Polaritons in Two-Dimensional Semiconductors, *Ph.D. thesis*, Universidad Autonoma de Madrid.