

**BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO
TRƯỜNG ĐẠI HỌC MỎ - ĐỊA CHẤT**



**BÁO CÁO HỌC THUẬT
NĂM HỌC 2025-2026**

**GIẢN ĐỒ PHA TRẠNG THÁI NGỪNG TỤ CỦA HỆ
EXCITON-POLARITON-PHOTON**

Người báo cáo: **Đỗ Thị Hồng Hải**

Đơn vị: **Bộ môn Vật lý, Khoa KHCB**

Hà Nội – 6/2026

MỞ ĐẦU

1. Mô hình và tính toán giải tích

Để mô tả hệ exciton-polariton-photon trong vi hốc bán dẫn, chúng ta sử dụng mô hình hai dải năng lượng có tương tác Coulomb và tương tác điện từ/lỗ trống-photon với Hamiltonian được viết trong không gian xung lượng dưới dạng sau

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}}^e e_{\mathbf{k}}^\dagger e_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}}^h h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}}) \\ & - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_1}^\dagger e_{\mathbf{k}_1} h_{-\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}^\dagger h_{\mathbf{k}_2} \\ & - \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{q}} + p_{\mathbf{q}}^\dagger e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} h_{-\mathbf{k}})\end{aligned}\quad (1.1)$$

trong đó, số hạng đầu tiên biểu thị phần năng lượng không tương tác của hệ các hạt trong vi hốc gồm điện tử dải dẫn với toán tử hủy (sinh) điện tử $e_{\mathbf{k}}(e_{\mathbf{k}}^\dagger)$, lỗ trống dải hóa trị với toán tử hủy (sinh) lỗ trống $h_{\mathbf{k}}(h_{\mathbf{k}}^\dagger)$ và photon với toán tử hủy (sinh) photon $p_{\mathbf{k}}(p_{\mathbf{k}}^\dagger)$. Năng lượng kích thích $\omega_{\mathbf{k}}$ của photon phụ thuộc xung lượng $\mathbf{k}$ được cho dưới dạng sau

$$\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\mathbf{k}^2 + \omega_c^2} - \mu \quad (1.2)$$

với ω_c là năng lượng của photon tại điểm 0 của vi hốc và c và vận tốc ánh sáng trong vi hốc. Trong hệ hai chiều, các năng lượng tán sắc của điện tử và lỗ trống được xác định bởi

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{e(h)} = -2t^{e(h)} \sum_{i=1}^2 \cos k_i + \frac{E_g + 8t^{e(h)} - \mu}{2} \quad (1.3)$$

trong đó $t^{e(h)}$ là biên độ nhảy nút liền kề của điện tử (lỗ trống). Đại lượng này tỉ lệ nghịch với khối lượng và do đó biểu thị mối tương quan về khối lượng hiệu dụng giữa điện tử và lỗ trống trong hệ. Thông thường, t^e được chọn lớn hơn t^h thể hiện dải dẫn rộng hơn dải hóa trị hay điện tử linh động hơn, “nhẹ” hơn lỗ trống. Trong công thức (1.3), E_g là khe năng lượng biểu thị khoảng cách từ đáy của dải dẫn tới đỉnh của dải hóa trị. Tùy theo giá trị âm hay dương của E_g mà hệ có thể tồn tại ở pha bán kim loại hoặc pha bán dẫn. 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

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\langle p_{\mathbf{k}}^{\dagger} p_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{2} \langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} e_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{2} \langle h_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{\mathbf{k}} \rangle \right) \quad (1.4)$$

Hai số hạng còn lại trong Hamiltonian (1.1) lần lượt mô tả phần năng lượng tương tác giữa các điện tử - lỗ trống với cường độ thế tương tác Coulomb U và phần năng lượng tương tác điện tử/lỗ trống - photon với hằng số tương tác g . Ảnh hưởng của phần năng lượng tương tác điện tử/lỗ trống – photon lên Hamiltonian toàn phần (1.1) trong sự hình thành trạng thái liên kết và ngưng tụ của exciton – photon trong vi hốc sẽ đóng vai trò quan trọng khi năng lượng kích thích exciton phù hợp với năng lượng kích thích photon. Do đó, để thuận lợi trong việc mô tả những ảnh hưởng này, chúng tôi đưa vào tham số điều chỉnh $d = \omega_c - E_g$. Nếu tham số này nhỏ, năng lượng kích thích exciton nằm gần đáy của dải năng lượng photon khiến cho sự đóng góp của photon trở nên quan trọng và ngược lại.

Để giải Hamiltonian (1.1), chúng tôi sử dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn để trung bình hóa các tương tác, đưa bài toán hệ nhiều hạt về bài toán một hạt bằng cách loại bỏ các vô cùng bé và hằng số, ví dụ như

$$\begin{aligned} e_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_1}^{\dagger} e_{\mathbf{k}_1} h_{-\mathbf{k}+\mathbf{k}_2}^{\dagger} h_{\mathbf{k}_2} &\approx \delta_{\mathbf{k},0} (\langle e_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} e_{\mathbf{k}_1} \rangle h_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} h_{\mathbf{k}_2} + \langle h_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} h_{\mathbf{k}_2} \rangle e_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} e_{\mathbf{k}_1}) \\ &+ \delta_{\mathbf{k}_1,-\mathbf{k}_2} (\langle e_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}_1}^{\dagger} \rangle e_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_1}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}^{\dagger} + H.c.) \end{aligned} \quad (1.5)$$

và

$$e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger} p_{\mathbf{q}} \approx \delta_{\mathbf{q},0} (\langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle p_{\mathbf{q}} + \langle p_{\mathbf{q}} \rangle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger}) \quad (1.6)$$

Áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn, Hamiltonian toàn phần trong phương trình (1.1) được tách thành hai phần là phần điện tử và photon. Để có thể thảo luận về sự hình thành trạng thái ngưng tụ exciton – polariton trong hệ, ta cần xác định được các giá trị kỳ vọng thông qua Hamiltonian chéo hóa hoàn toàn. Trong đó, phần điện tử được chéo hóa nhờ phương pháp Bogoliubov định nghĩa các toán tử fermion mới

$$\begin{aligned} b_{1\mathbf{k}}^{\dagger} &= u_{\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}} h_{-\mathbf{k}} \\ b_{2\mathbf{k}}^{\dagger} &= -v_{\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}} h_{-\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (1.7)$$

với $u_{\mathbf{k}}$ và $v_{\mathbf{k}}$ là các hệ số được chọn thỏa mãn $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$. Còn phần photon trong Hamiltonian được chéo hóa bằng việc định nghĩa toán tử photon mới

$$p_{\mathbf{q}}^{\dagger} = p_{\mathbf{q}}^{\dagger} - \frac{g}{\sqrt{N}} \frac{\sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{q}=0}} \delta_{\mathbf{q},0} \quad (1.8)$$

trong đó $d_{\mathbf{k}} = \langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle$ đặc trưng cho mật độ exciton biểu thị sự lai hóa điện tử - lỗ trống nên được xem là tham số trật tự exciton. Hệ sẽ tồn tại trong trạng thái ngưng tụ khi tham số trật tự khác không và ngược lại.

Như vậy, Hamiltonian chéo hóa trong gần đúng Hartree-Fock không giới hạn được biểu diễn dưới dạng toàn phương của các toán tử sinh, hủy và được viết lại như sau

$$\mathcal{H}_{UHFA} = \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}}^1 b_{1\mathbf{k}}^{\dagger} b_{1\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}^2 b_{2\mathbf{k}}^{\dagger} b_{2\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}}^{\dagger} p_{\mathbf{k}}) \quad (1.9)$$

trong đó các năng lượng chuẩn hạt fermion $E_{\mathbf{k}}^{1,2}$ được cho bởi

$$E_{\mathbf{k}}^{1,2} = \frac{1}{2} [\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^h - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^e \pm \text{sgn}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^h + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^e) W_{\mathbf{k}}] \quad (1.10)$$

với

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^h = \epsilon_{\mathbf{k}}^h - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} e_{\mathbf{k}} \rangle \quad (1.11)$$

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^e = \epsilon_{\mathbf{k}}^e - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle h_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{\mathbf{k}} \rangle \quad (1.12)$$

là năng lượng kích thích của các điện tử và lỗ trống khi có dịch chuyển Hartree

$$W_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^h + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^e)^2 + 4|\Delta|^2} \quad (1.13)$$

$$\Delta = -\frac{g^2}{N\omega_{\mathbf{q}=0}} \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} \quad (1.14)$$

Δ trong công thức (1.14) có chứa $d_{\mathbf{k}} = \langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle$ nên cũng được xem là tham số trật tự mô tả trạng thái ngưng tụ exciton-polariton trong hệ. Đặc biệt, tính chất của trạng thái ngưng tụ exciton-polariton trong hệ phụ thuộc vào sự cạnh tranh giữa hai tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton $\Delta_{exc} = -\frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}$ và tham số trật tự trạng thái ngưng tụ photon $\Delta_{ph} = -\frac{g^2}{N\omega_0} \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}$.

Từ Hamiltonian chéo hóa hoàn toàn được biểu diễn ở phương trình (1.9), chúng ta xác định được mật độ exciton phụ thuộc xung lượng

$$d_{\mathbf{k}} = [f^F(E_{\mathbf{k}}^1) - f^F(E_{\mathbf{k}}^2)] \frac{\text{sgn}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^h + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^e) \cdot \Delta}{W_{\mathbf{k}}} \quad (1.15)$$

trong đó $f^F(\epsilon) = 1/(e^{\epsilon/T} + 1)$ là hàm phân bố Fermi-Dirac với T là nhiệt độ tuyệt đối. Từ đây ta nhận được hệ phương trình tự hợp để xác định các tham số

trật tự trạng thái ngưng tụ exciton và polariton. Tương tự, ta cũng xác định được mật độ photon theo xung lượng từ Hamiltonian chéo hóa (1.9) ở trên

$$n_{\mathbf{q}}^{ph} = \langle P_{\mathbf{q}}^{\dagger} P_{\mathbf{q}} \rangle = n^{BE}(\omega_{\mathbf{q}}) + \frac{1}{N} \left(\frac{g \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{q}=0}} \right)^2 \delta_{\mathbf{q},0} \quad (1.16)$$

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

Tuy nhiên, nếu chỉ xem xét tính chất của tham số trật tự, ta chỉ có thể mô tả được đặc tính của hệ trong trạng thái ngưng tụ ở trên điểm chuyển pha. Do đó, trong đề tài này, chúng tôi phân tích thêm tính chất của hàm cảm ứng tĩnh exciton và photon để có thể mô tả chuyển pha trạng thái ngưng tụ của hệ exciton-polariton ở dưới điểm chuyển pha, Từ đó ta có thể hiểu rõ được cơ chế chuyển pha cũng như bản chất của các trạng thái ngưng tụ.

Không mất tính tổng quát, trong các tính toán số, chúng tôi chọn $t^e = 1$ được coi là đơn vị của năng lượng và cố định $\omega_c = 0.5$ và $g = 0.2$. Thế hóa μ được điều chỉnh đảm bảo hệ có tổng mật độ hạt được xác định bởi

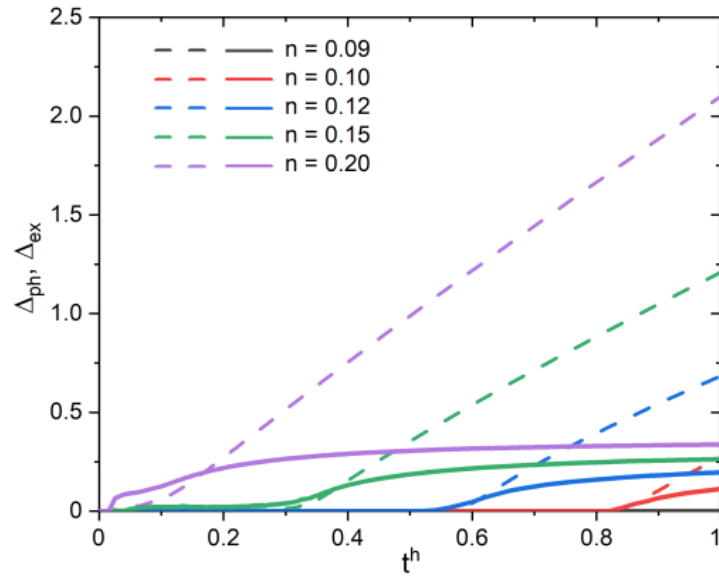
$$n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\langle p_{\mathbf{k}}^{\dagger} p_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{2} \langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} e_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{2} \langle h_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{\mathbf{k}} \rangle \right)$$

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.

2. Tham số trật tự exciton và photon khi có mất cân bằng khối lượng

Để xem xét tính ổn định của các trạng thái ngưng tụ polariton trong cấu trúc vi hốc ảnh hưởng bởi sự mất cân bằng khối lượng, trong phần này, chúng tôi trình bày các kết quả tính số tham số trật tự Δ_{exc} và Δ_{ph} như một hàm của tích phân nhảy nút của lỗ trống t^h trong trạng thái cơ bản. Trong nghiên cứu này, chúng tôi lựa chọn tham số điều chỉnh $\delta = 2.0$ và khảo sát khi thế tương tác Coulomb $U = 1.0$ với một vài giá trị của mật độ kích thích n được cho bởi phương trình trên. Hình 1 cho thấy tại mật độ kích thích n xác định, khi tăng t^h hay giảm mất cân bằng khối lượng, chúng ta luôn tìm thấy sự tăng cường của các tham số trật tự exciton và photon. Thực vậy, khi t^h nhỏ hay khối lượng hiệu dụng của lỗ trống lớn so với khối lượng hiệu dụng của điện tử, các lỗ trống kém linh hoạt và do đó hạn chế khả năng lai hóa giữa điện tử và lỗ trống hình thành exciton. Và như vậy, khi $t^h = 0$, dải hóa trị của lỗ trống hoàn toàn trải phẳng, hay khối lượng lỗ trống vô cùng lớn thì cả hai tham số trật tự Δ_{exc} và Δ_{ph} đều bằng 0. Hình 1 cũng cho thấy, ở mật độ kích thích thấp, sự ngưng tụ của các

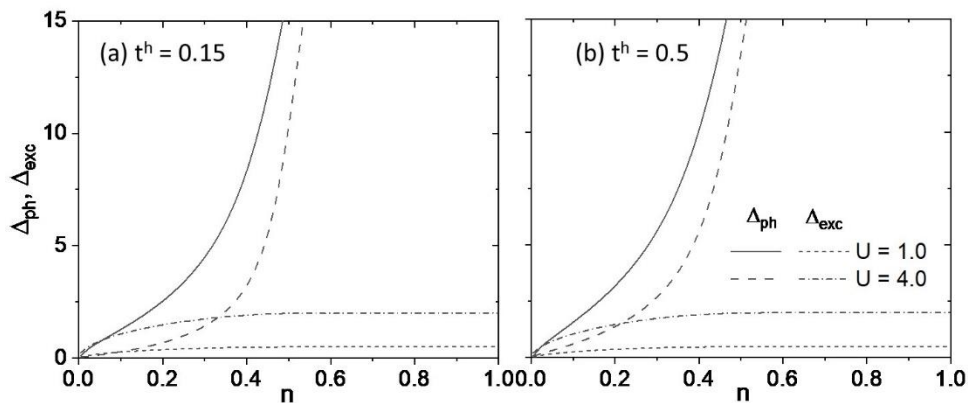
exciton và photon trong vi hốc chỉ xuất hiện nếu t^h đủ lớn. Những kết quả này hoàn toàn phù hợp với các dữ liệu quan sát thực nghiệm [1]. Điều này cho thấy ZnO thể hiện ngưng tụ polariton ổn định hơn khi so sánh với GaN. Lưu ý rằng sự mất cân bằng khối lượng của điện tử và lỗ trống trong ZnO (~ 0.53 [2]) lớn hơn trong GaN (~ 0.16 [3]). Tăng mật độ kích thích. Giá trị tới hạn của tích phân nhảy nút t^h cho sự hình thành trạng thái ngưng tụ dịch sang trái tương ứng với giá trị thấp hơn của tích phân nhảy nút. Trong trường hợp mật độ kích thích lớn, ta cũng tìm thấy giá trị bão hòa của tham số trật tự exciton Δ_{exc} trong khi Δ_{ph} vẫn tiếp tục tăng khi tăng t^h . Thật vậy, khi tăng t^h , làm cho số lượng các cặp điện tử - lỗ trống tăng lên cho đến khi dải lỗ trống chạm đáy dải photon và khi đó các photon sẽ thay thế các cặp điện tử - lỗ trống để giảm thiểu năng lượng toàn phần.



Hình 1: Tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton Δ_{exc} (đường liền nét) và photon Δ_{ph} (đường đứt nét) theo tích phân nhảy nút t^h ứng với một vài giá trị của mật độ kích thích n khi $U = 1.0$ và $\delta = 2.0$.

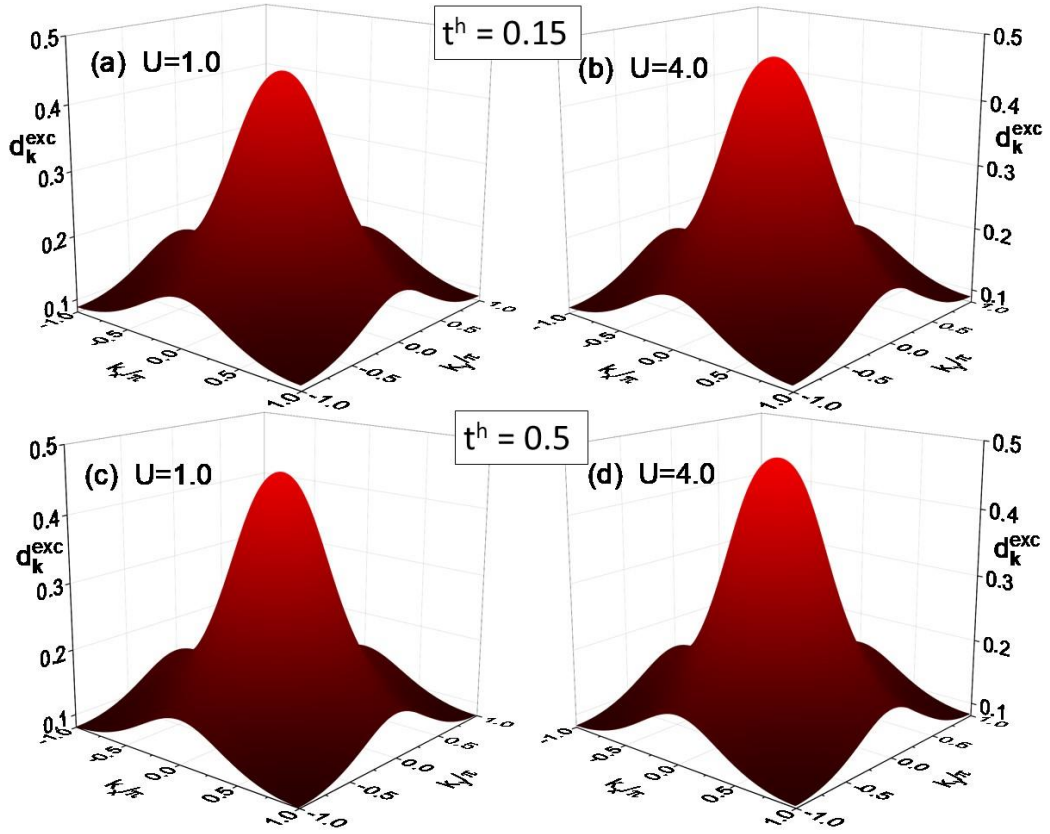
Để phân tích ảnh hưởng của thể tương tác Coulomb U và tổng mật độ kích thích n lên sự hình thành các trạng thái ngưng tụ trong hệ, chúng tôi biểu thị trên Hình 2 sự phụ thuộc của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton Δ_{exc} và tham số trật tự trạng thái ngưng tụ photon Δ_{ph} theo mật độ kích thích n khi thay đổi cường độ tương tác Coulomb tại nhiệt độ không khi $\delta = -1.0$. Hình 2 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, khi tăng tương tác Coulomb làm 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 ($U = 1.0$) sang giới hạn tương tác mạnh ($U = 4.0$) cũng thể hiện cấu trúc pha phức tạp trong hệ. Trên Hình 2a, chúng tôi lựa chọn $t^h = 0.15$ để phù hợp với hệ điện tử-lỗ trống trong vi hốc bán dẫn GaAs [4, 5]. 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 sang 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.



Hình 2: 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 $\delta = -1.0$; $t^h = 0.15$ (Hình a) và $t^h = 0.5$ (Hình b).

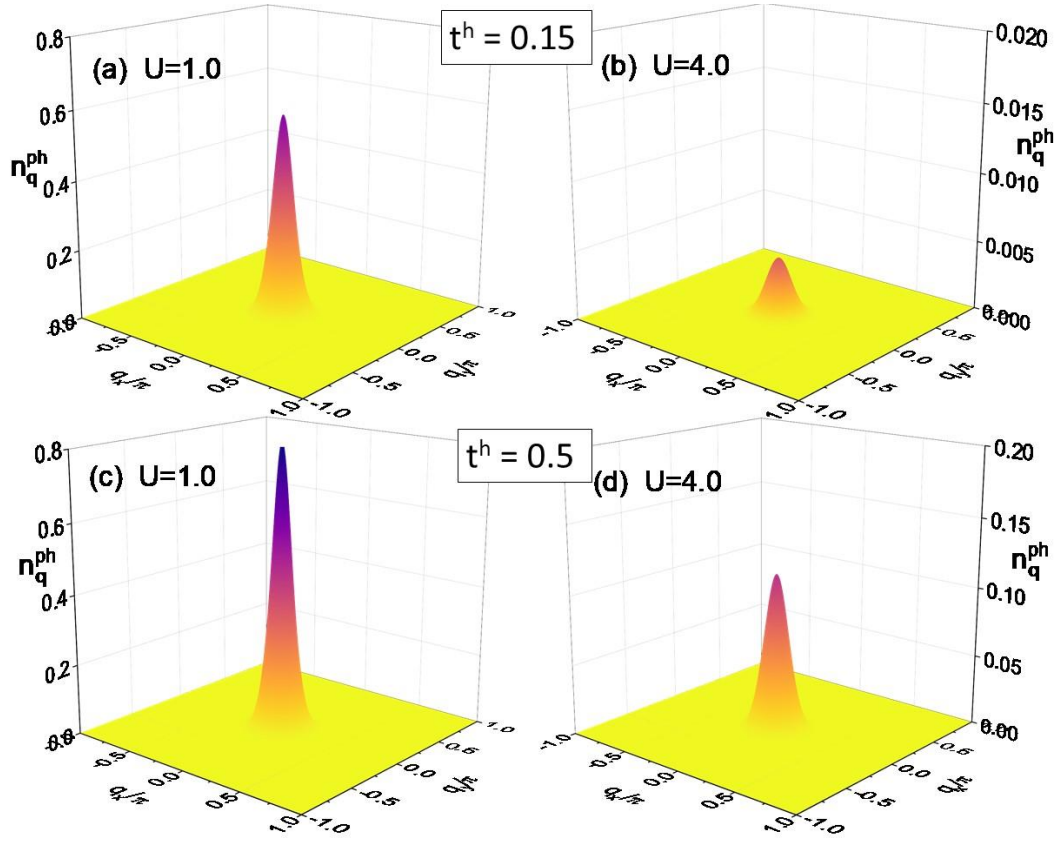
Tăng tích phân nhảy nút tới $t^h = 0.5$ tương đương với hệ bán dẫn CdTe [6], Hình 2b cho thấy sự tăng đáng kể của Δ_{ph} và do đó cấu trúc pha ngưng tụ của hệ cũng thay đổi, giá trị tới hạn của mật độ kích thích cho sự tồn tại của hệ trong trạng thái ngưng tụ polariton giảm. Với tương tác Coulomb nhỏ, 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.



Hình 3: Mật độ exciton d_k^{exc} phụ thuộc vào xung lượng $\mathbf{k}$ trong vùng Brillouin thứ nhất khi thay đổi thế tương tác Coulomb U và tích phân nhảy nút t^h tại $\delta = -1.0$; $n = 0.05$.

Tiếp theo, để thấy rõ hơn ảnh hưởng của thế tương tác Coulomb U và sự mất cân bằng khối lượng lên bản chất trạng thái ngưng tụ của hệ exciton, polariton và photon, chúng tôi biểu thị trên Hình 3 sự phụ thuộc vào xung lượng của mật độ exciton d_k^{exc} và mật độ photon n_q^{ph} ứng với hai giá trị của thế tương tác Coulomb U và tích phân nhảy nút t^h khi mật độ kích thích $n = 0.05$. Hình 3 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 Bose-Einstein (BEC). Kết quả này hoàn toàn

phù hợp với thực tế do trong trường hợp này chúng tôi lựa chọn tham số điều chỉnh đảm bảo xét hệ exciton-polariton trong vi hốc bán dẫn. 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 mật độ 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 4.



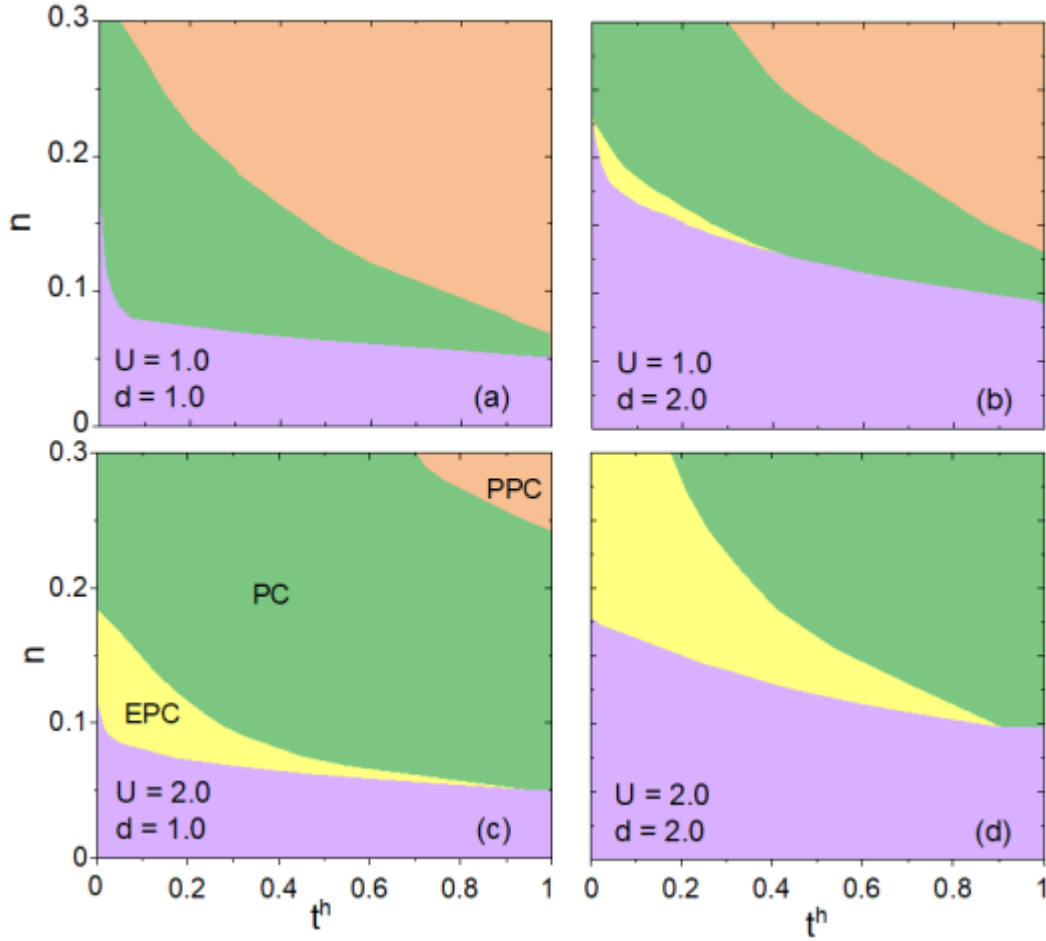
Hình 4: Mật độ exciton n_q^{ph} phụ thuộc vào xung lượng $\mathbf{q}$ trong vùng Brillouin thứ nhất khi thay đổi thể tương tác Coulomb U và tích phân nhảy nút t^h tại $\delta = -1.0$ $n = 0.05$.

Hình 4 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 4a với 4b và Hình 4c với 4d 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 3b, 4b). Ngược lại, tại U xác định và tăng tích phân nhảy nút t^h 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 mật độ exciton d_k^{exc} và mật độ photon n_q^{ph} tại xung lượng không đều tăng lên (xem Hình 3 a,c và Hình 4 a,c) thể hiện hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ polariton dạng BEC.

3. Giảm đồ pha trạng thái ngưng tụ exciton theo mật độ và sự mất cân bằng khối lượng

Cuối cùng, để có một bức tranh toàn diện về vai trò của mất cân bằng khối lượng và mật độ kích thích lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ của polariton trong vi hốc bán dẫn, trong phần này chúng tôi thiết lập giản đồ pha trạng thái cơ bản trong mặt phẳng (t^h, n) với một số cặp giá trị của U và δ . Để có được các giản đồ pha thể hiện sự chuyển của hệ từ trạng thái bình thường và trạng thái hỗn loạn sang trạng thái ngưng tụ, chúng tôi thiết lập chương trình tính số để tìm giá trị tới hạn của tích phân nhảy nút t^h mà tại đó hàm cảm ứng tĩnh phân kỳ ứng với một giá trị xác định của mật độ kích thích. Trong khi đó, để xem xét sự cạnh tranh của các exciton và photon trong việc thiết lập các trạng thái ngưng tụ, chúng tôi cũng đề cập đến trên giản đồ pha các trạng thái ngưng tụ dạng exciton-polariton (EPC) và photon-polariton (PPC) bên cạnh trạng thái ngưng tụ polariton (PC). Trạng thái ngưng tụ sẽ ở dạng PPC nếu tỷ lệ của các tham số trật tự $\Delta_{ph}/\Delta > 80\%$, ở dạng EPC nếu $\Delta_{ph}/\Delta < 20\%$ và còn lại là ở dạng PC [7, 8].



Hình 5: Giản đồ pha ngưng tụ polariton trong mặt phẳng (t^h, n) với một số cặp giá trị của U và δ . Pha ngưng tụ polariton dạng EPC, PC và PPC được chỉ ra tương ứng bởi vùng màu vàng, xanh và cam. Màu tím chỉ trạng thái hỗn loạn bình thường của hệ điện tử-lỗ trống-photon.

Hình 5 cho thấy, với tất cả các cặp giá trị của U và δ , chúng ta luôn tìm thấy sự mở rộng của các trạng thái ngưng tụ khi giảm mất cân bằng khối lượng. Trong trường hợp tương tác Coulomb nhỏ ($U = 1.0$) và tham số điều chỉnh nhỏ ($\delta = 1.0$), trạng thái PC được thiết lập nếu tích phân nhảy nút lớn hơn một giá trị tới hạn với mật độ kích thích đủ lớn (xem Hình 5a). Trong khi đó, trạng thái PPC chỉ được tìm thấy khi mật độ kích thích được tăng thêm. Tăng tích phân nhảy nút của lỗ trống hay làm giảm mất cân bằng khối lượng, độ linh động của lỗ trống được tăng lên thúc đẩy các trạng thái liên kết exciton-photon do tương tác vật chất-ánh sáng. Do đó, các photon trở thành đối tượng đóng góp chính vào trạng thái kết hợp polariton. Điều này làm cho trạng thái PPC được mở rộng khi hệ điện tử-lỗ

trống có xu hướng chuyển tới tình huống cân bằng khối lượng. Việc tăng tham số điều chỉnh đã củng cố sự chồng chéo giữa các dải hóa trị và dải dẫn không tương tác, do đó trạng thái kết hợp điện tử-lỗ trống và khi đó ta có trạng thái ngưng tụ dạng EPC ở t^h nhỏ (xem Hình 5b). Tăng t^h hơn nữa, sự đóng góp của photon vào trạng thái liên kết của polariton trở nên đáng kể và do đó trạng thái PC, tiếp theo là PPC được thiết lập khi tăng mật độ kích thích. Tại $U = 2.0$ và $\delta = 1.0$, ta nhận thấy sự mở rộng của vùng EPC, đặc biệt là ở t^h nhỏ hay mất cân bằng khối lượng lớn (xem Hình 5c). Trong trường hợp này, việc tăng cường tương tác Coulomb đã thúc đẩy trạng thái liên kết điện tử - lỗ trống và số lượng các exciton trở nên đáng kể khi dải hóa trị vẫn còn hẹp. Giảm sự mất cân bằng khối lượng hay mở rộng dải hóa trị của lỗ trống, các photon dần đóng vai trò của chúng trong sự kết hợp polariton và do đó trạng thái PC được thiết lập. Do tương tác Coulomb lớn hơn, trạng thái PC cũng được mở rộng tới vùng mật độ kích thích lớn. Vùng ngưng tụ dạng EPC và sau đó là PC cũng được mở rộng hơn nữa trong trường hợp tham số điều chỉnh lớn hơn. (xem Hình 5d). Lưu ý rằng việc tăng tham số điều chỉnh đã làm tăng sự chồng chéo của dải hóa trị và dải dẫn, và do đó các photon sẽ không còn đóng vai trò quan trọng trong việc thiết lập trạng thái liên kết ở mật độ kích thích nhỏ. Điều này làm tăng giá trị tới hạn của mật độ kích thích cho sự ổn định của trạng thái lượng tử kết hợp trong vi hốc.

Giản đồ pha nhận được của chúng tôi ở đây khá phù hợp với các quan sát thực nghiệm, ít nhất là về mặt định tính. Thật vậy, ở nhiệt độ rất thấp, các nghiên cứu về vi hốc dựa trên ZnO đã chỉ rõ trạng thái ngưng tụ của polariton đặc trưng bởi sự gia tăng của exciton (lên tới 96%) và sự giảm của photon (xuống còn 4%) khi tăng tham số điều chỉnh tới 450 meV. Quan sát này tương đồng với giản đồ pha của chúng tôi tại nhiệt độ không, trong đó vùng EPC trở nên chiếm ưu thế khi tăng tham số điều chỉnh trong khi vùng PPC bị thu hẹp dần. Hành vi này phù hợp với các quan sát thực nghiệm liên quan đến sự thay đổi của số exciton và photon khi thay đổi tham số điều chỉnh [9-11]. Hơn nữa, các giản đồ pha được biểu thị trên Hình 10 cũng làm nổi bật sự tăng trưởng của vùng PC và sau đó là PPC khi tăng mật độ kích thích. Xu hướng này phù hợp với các quan

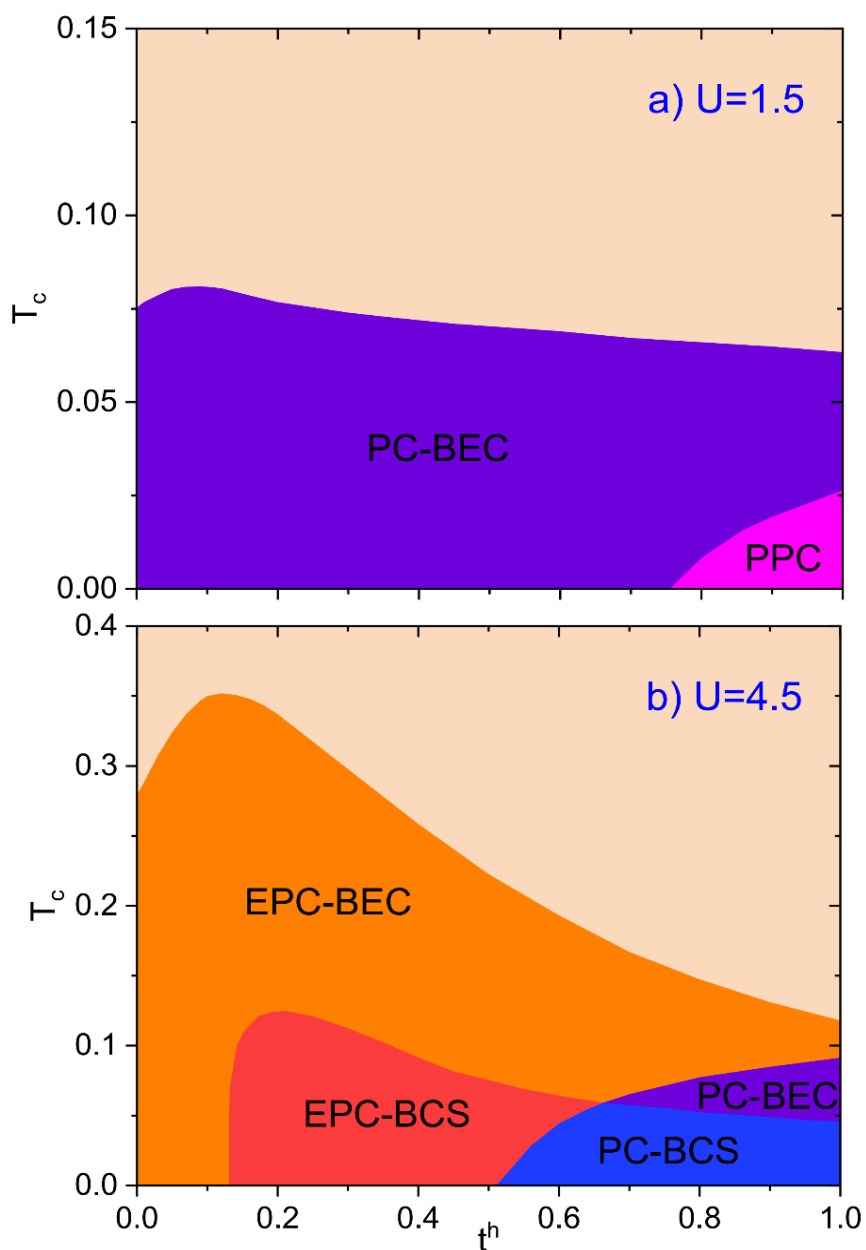
sat thực nghiệm trong vi hốc giếng lượng tử GaAs trong sự tăng của công suất kích thích dẫn đến sự chuyển đổi từ trạng thái PC sang trạng thái laser photon thuần túy, được đặc trưng bởi sự giảm dần của phần exciton [12, 13].

Cuối cùng, để tóm tắt ảnh hưởng của nhiệt độ, sự mất cân bằng khối lượng và tương tác Coulomb giữa điện tử - lỗ trống đến sự ổn định của các trạng thái ngưng tụ trong vi hốc quang, chúng tôi trình bày trên Hình 6 giản đồ pha trong mặt phẳng (t^h , T_c) với $U = 1.5$ (hình a) và $U = 4,5$ (hình b). Các pha ngưng tụ được xác định dựa trên tỉ số của tham số trật tự Δ_{ph}/Δ . Đặc tính BCS hoặc BEC của mỗi pha cũng được biểu thị trên hình và được xác định từ sự phụ thuộc xung lượng của mật độ exciton d_k .

Trong trường hợp tương tác Coulomb yếu, pha ngưng tụ bị giới hạn ở nhiệt độ thấp và chủ yếu có bản chất PC (xem Hình 6 a). Với t^h nhỏ và trung bình, hệ tồn tại trong trạng thái PC-BEC. Khối lượng hiệu dụng lớn của các lỗ trống làm giảm động năng, cho phép lực hút Coulomb tạo ra các cặp điện tử - lỗ trống liên kết chặt ngưng tụ ở xung lượng $\mathbf{k} = 0$. Khi t^h tăng lên sao cho khối lượng điện tử - lỗ trống gần như cân bằng, độ rộng dải hóa trị trở nên tương đương với độ rộng của dải dẫn, làm tăng động năng toàn phần và làm cho cấu trúc dải trở nên đối xứng hơn. Kết quả là làm thay đổi sự cân bằng lai hóa giữa các thành phần điện tử và photon và dịch chuyển trọng lượng phổ về phía trường vi hốc, dẫn đến sự xuất hiện của vùng PPC hẹp ở nhiệt độ thấp. Khi nhiệt độ tăng, năng lượng nhiệt nhanh chóng ức chế sự ngưng tụ trên toàn bộ phạm vi t^h , và không có ngưng tụ dạng BCS nào phát triển trong trường hợp này.

Ngược lại, trường hợp tương tác Coulomb mạnh thể hiện cấu trúc pha phức tạp hơn nhiều và độ ổn định được tăng cường đáng kể (xem Hình 6 b). Với t^h nhỏ, hệ tồn tại trong pha EPC-BEC đặc trưng bởi các exciton liên kết chặt với phân bố xung lượng đạt đỉnh tại $\mathbf{k} = 0$. Khi t^h tăng lên các giá trị trung bình và lớn, tính đối xứng và tán sắc dải được tăng cường thúc đẩy sự chồng chéo mạnh giữa dải dẫn và dải hóa trị. Trong giới hạn này, tương tác Coulomb lớn gây ra hiện tượng lai hóa rõ rệt và đảo ngược dải gần mức Fermi báo hiệu trạng thái ngưng tụ dạng BCS. Do đó, ở nhiệt độ thấp, việc tăng nhiệt độ sẽ dẫn đến sự chuyển đổi trạng thái ngưng tụ từ dạng EPC-BEC sang EPC-BCS và cuối cùng là

PC-BCS khi cấu trúc dải trở nên đối xứng hơn trong tình trạng cân bằng. Khi nhiệt độ tăng, dao động nhiệt làm giảm độ lớn của tham số trật tự ngưng tụ exciton, do đó làm suy yếu liên kết điện tử-lỗ trống chịu trách nhiệm cho sự đảo ngược dải. Do đó, các dải năng lượng giả hạt dần dần khôi phục lại đặc tính ban



Hình 6: Giản đồ pha ngưng tụ polariton trong mặt phẳng (t^h, T_c) với hai giá trị của U khi $n = 0.1$; $g = 0.2$ và $\delta = -0.5$. Pha ngưng tụ polariton dạng EPC-BEC, EPC-BCS, PC-BEC, PC-BCS và PPC được chỉ ra tương ứng bởi vùng màu cam, đỏ, tím, xanh và hồng. Màu cam nhạt chỉ trạng thái hỗn loạn bình thường của hệ điện tử-lỗ trống-photon.

đầu của chúng, cấu trúc ghép cặp được xác định bởi xung lượng Fermi không còn nữa và sự phân bố xung lượng của $d_{\mathbf{k}}$ trở nên tập trung xung quanh xung lượng $\mathbf{k} = 0$. Sự triệt tiêu đảo ngược dải này thúc đẩy hệ chuyển một cách tự nhiên từ trạng thái ngưng tụ dạng BCS sang cấu trúc ngưng tụ dạng BEC trước khi trạng thái ngưng tụ bị phá hủy hoàn toàn ở nhiệt độ cao hơn.

KẾT LUẬN

Như vậy, trong học thuật này, chúng tôi đã thực hiện chương trình tính số để khảo sát ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng lên sự hình thành và ngưng tụ của polariton trong vi hốc bán dẫn ở trạng thái cơ bản. Các giản đồ pha cho thấy khi giảm mất cân bằng khối lượng, trạng thái liên kết điện tử - lỗ trống đạt đến đáy dải photon và hỗ trợ mạnh mẽ cho sự ngưng tụ của polariton. Sự ngưng tụ polariton ở dạng ngưng tụ exciton-polariton nếu mất cân bằng khối lượng lớn, trong khi nó thể hiện dạng ngưng tụ photon-polariton nếu mất cân bằng khối lượng ít. Các giản đồ pha minh họa sự mở rộng của vùng ngưng tụ polariton khi giảm mất cân bằng khối lượng cũng được thể hiện. Tăng cường độ tương tác Coulomb hoặc giảm tham số điều chỉnh cũng thúc đẩy sự gia tăng của các trạng thái kết hợp lượng tử trong hệ. Kết quả của chúng tôi phù hợp ít nhất về mặt định tính với các quan sát thực nghiệm về sự ổn định của polariton trong một vài vi hốc quang bán dẫn mất cân bằng khối lượng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] O. Jamadi, F. Réveret, E. Mallet, P. Disseix, F. Médard, M. Mihailovic, D. Solnyshkov, G. Malpuech, J. Leymarie, X. Lafosse, S. Bouchoule, F. Li, M. Leroux, F. Semond, and J. Zuniga-Perez, Polariton condensation phase diagram in wide band-gap planar microcavities: GaN versus ZnO, *Phys. Rev. B* 93, 115205 (2016).
- [2] B. Enright and D. Fitzmaurice, Spectroscopic determination of electron and hole effective masses in a nanocrystalline semiconductor film, *J. Phys. Chem.* 100, 1027 (1996).
- [3] M. Suzuki, T. Uenoyama, and A. Yanase First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN, *Phys. Rev. B* 52, 8132 (1995).
- [4] W. Nakwaski. (1995). Effective Masses of Electrons and Heavy Holes in GaAs, InAs, AlAs and Their Ternary Compounds. *Physica B: Condens. Mat.* 210. 1.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] K. Kamide and T. Ogawa, Ground-state properties of microcavity polariton condensates at arbitrary excitation density, *Phys. Rev. B* 83, 165319 (2011).
- [8] K. Kamide and T. Ogawa, What determines the wave function of electron-hole pairs in polariton condensates? *Phys.Rev.Lett.* 105, 056401 (2010).
- [9] M. Steger, C. Gautham, D. W. Snoke, L. Pfeiffer, and K. West, Slow reflection and two-photon generation of microcavity exciton–polaritons, *Optica* 2, 1 (2015).
- [10] D. W. Snoke, V. Hartwell, J. Beaumariage, S. Mukherjee, Y. Yoon, D. M. Myers, M. Steger, Z. Sun, K. A. Nelson, and L. N. Pfeiffer, Reanalysis of experimental determinations of polariton-polariton interactions in microcavities,

Phys. Rev. B 107, 165302 (2023).

[11] J. Beaumariage, Z. Sun, H. Alnatah, Q. Yao, D. M. Myers, M. Steger, K. West, K. Baldwin, L. N. Pfeiffer, M. C. A. Tam, Z. R. Wailewski, and D. W. Snoke, Measurement of exciton fraction of microcavity exciton-polaritons using transfer-matrix modeling, arXiv:2406.12940.

[12] H. Cao, S. Pau, J. M. Jacobson, G. Björk, Y. Yamamoto, and A. Imamoglu, Transition from a microcavity exciton polariton to a photon laser, Phys. Rev. A 55, 4632 (1997).

[13] M. Klaas, E. Schlottmann, H. Flayac, F. P. Laussy, F. Gericke, M. Schmidt, M. v. Helversen, J. Beyer, S. Brodbeck, H. Suchomel, S. Höfling, S. Reitzenstein, and C. Schneider, Photon-number-resolved measurement of an exciton-polariton condensate, Phys. Rev. Lett. 121, 047401 (2018).