

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO
TRƯỜNG ĐẠI HỌC GIAO THÔNG VẬN TẢI



KỶ YẾU
HỘI THẢO “GIẢNG DẠY VÀ NGHIÊN CỨU
KHOA HỌC CƠ BẢN NĂM 2026”

NHÀ XUẤT BẢN GIAO THÔNG VẬN TẢI
HÀ NỘI - 2026

TT	NỘI DUNG	Trang
28	ẢNH HƯỞNG CỦA NHIỆT ĐỘ LÊN NGỪNG TỤ EXCITON-POLARITON TRONG VI HỐC MẮT CÂN BẰNG KHỐI LƯỢNG <i>Đỗ Thị Hồng Hải, Nguyễn Thị Hậu</i>	287
29	CÁC ĐẶC TRƯNG PHI CỎ ĐIỆN CỦA TRẠNG THÁI FOCK CHỒNG CHẤT THÊM VÀ KHỦ ĐƠN PHOTON <i>Phan Thị Hiền Anh</i>	297
30	KHẢO SÁT TÍNH CHẤT ĐIỆN SẮC VÀ ĐẶC TÍNH NHẠY KHÍ NH ₃ CỦA VẬT LIỆU LAI HÓA GRAPHENE /WO ₃ <i>Nguyễn Tuấn Sơn</i>	303
31	KHẢO SÁT TRẠNG THÁI NGỪNG TỤ POLARITON TRONG HỆ ĐIỆN TỬ-LỖ TRỐNG MẮT CÂN BẰNG KHỐI LƯỢNG THÔNG QUA HÀM PHỔ ĐƠN HẠT <i>Nguyễn Thị Hậu, Đỗ Thị Hồng Hải</i>	313
32	NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC TINH THỂ, TÍNH CHẤT ĐA PHA ĐIỆN TỬ CỦA VẬT LIỆU BiFeO ₃ PHA TẠP La <i>Đào Việt Thắng, Nguyễn Mạnh Hùng</i>	324
33	TẦM QUAN TRỌNG CỦA GIÁO CỤ THÍ NGHIỆM TRỰC QUAN TRONG GIẢNG DẠY VẬT LÝ TRONG CÁC TRƯỜNG ĐẠI HỌC <i>Nguyễn Xuân Chung</i>	331
34	TỔNG QUAN CHẾ TẠO, TÍNH CHẤT VÀ ỨNG DỤNG VẬT LIỆU NANO COMPOSITE Fe ₃ O ₄ /rGO/SiO ₂ <i>Nguyễn Phi Hùng, Nguyễn Trường Giang</i>	338
35	TỔNG QUAN VỀ VẬT LIỆU Fe ₃ O ₄ /C/Ag: CẤU TRÚC, TỔNG HỢP, ỨNG DỤNG VÀ TRIỂN VỌNG <i>Nguyễn Phi Hùng, Nguyễn Trường Giang</i>	346
36	THANH NANO ZnO TỔNG HỢP TỪ THỦY NHIỆT CHO NHẠY KHÍ NO ₂ NHIỆT ĐỘ PHÒNG VỚI SỰ HỖ TRỢ CỦA TIA UV <i>Nguyễn Trường Giang</i>	354

ẢNH HƯỞNG CỦA NHIỆT ĐỘ LÊN NGƯNG TỤ EXCITON-POLARITON TRONG VI HỐC MẤT CÂN BẰNG KHỐI LƯỢNG

Đỗ Thị Hồng Hải^{1*}, Nguyễn Thị Hậu^{1,2}

¹ Trường Đại học Mỏ - Địa chất, 18 phố Viên, Đông Ngạc, Hà Nội

² Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam, 18 Hoàng Quốc Việt, Hà Nội

* Tác giả liên hệ: Email: dothihonghai@humg.edu.vn; Điện thoại: 0988905003

Tóm tắt. Ảnh hưởng của nhiệt độ và sự mất cân bằng khối lượng của điện tử - lỗ trống lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ của exciton - polariton trong vi hốc được khảo sát bằng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn. Hệ ổn định ở trạng thái ngưng tụ khi được làm lạnh đến nhiệt độ đủ thấp. Trạng thái ngưng tụ có dạng exciton-polariton (EPC) khi mất cân bằng khối lượng lớn và dạng polariton (PC) khi giảm mất cân bằng khối lượng. Tăng mật độ kích thích, vùng ngưng tụ được mở rộng. Ngưng tụ dạng exciton-polariton bị thu hẹp lại ở mất cân bằng khối lượng lớn, trong khi ngưng tụ dạng photon-polariton (PPC) được thiết lập và mở rộng khi khối lượng điện tử và lỗ trống tương đương nhau.

Từ khóa: mất cân bằng khối lượng điện tử-lỗ trống, ngưng tụ exciton-polariton-photon, Hartree-Fock không giới hạn, vi hốc bán dẫn.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Chuyển pha trạng thái trật tự trong các hệ điện tử tương quan mạnh luôn là vấn đề hấp dẫn trong vật lý chất rắn. Một trong những trạng thái trật tự luôn thu hút sự quan tâm nghiên cứu rất lớn trong cả lý thuyết và thực nghiệm là trạng thái ngưng tụ Bose-Einstein (Bose-Einstein condensation - BEC) của các hạt boson hoặc giả hạt boson. Khi hệ được làm lạnh đến nhiệt độ đủ thấp, một lượng đủ lớn các hạt hoặc giả hạt boson có thể đồng thời tồn tại trong một trạng thái lượng tử duy nhất [1]. Nhiệt độ tới hạn cho trạng thái ngưng tụ tỉ lệ nghịch với khối lượng hiệu dụng của hạt. Do đó, để có thể quan sát và ứng dụng được trạng thái BEC trong thực tế đòi hỏi hệ boson phải có khối lượng đủ nhỏ và thời gian sống đủ dài. Hệ các giả hạt exciton-polariton trong cấu trúc vi hốc là một hệ giả hạt boson đáp ứng được yêu cầu đó. Vi hốc là hệ tạo bởi hai gương có tính phản xạ cao được đặt song song và gần nhau. Trong cấu trúc này, polariton được hình thành do sự liên kết giữa photon bị giam cầm trong vi hốc với exciton (trạng thái kết cặp của điện tử và lỗ trống) được tạo thành trong giếng lượng tử đặt giữa hai gương. Polariton vì vậy có khối lượng hiệu dụng rất nhỏ, chỉ bằng 10^{-5} khối lượng của điện tử tự do và thời gian sống đủ dài cỡ 270 ps [2], hứa hẹn có thể quan sát được trạng thái BEC ở nhiệt độ phòng và mở ra khả năng chế tạo các linh kiện polariton trong tương lai.

Trạng thái ngưng tụ exciton-polariton trong cấu trúc vi hốc đã và đang là đối tượng thu hút sự tập trung nghiên cứu rất lớn của các nhóm nghiên cứu trên thế giới, đặc biệt từ những năm đầu của thế kỷ này [3-6]. Ở Việt Nam, các trạng thái ngưng tụ của hệ exciton - polariton trong cấu trúc vi hốc cũng được quan tâm nghiên cứu trong những năm gần đây [7-9]. Trong gần đúng trường trung bình tĩnh, các giản đồ pha mô tả sự cạnh tranh giữa các trạng thái ngưng tụ trong cấu trúc vi hốc như ngưng tụ exciton, ngưng tụ polariton, hay ngưng tụ photon được thể hiện một cách chi tiết khi tính tới ảnh hưởng của nhiệt độ, tương tác Coulomb, tương tác exciton-photon, hay tham số điều chỉnh. Gần đây, trạng thái siêu lỏng polariton trong cấu trúc vi hốc cũng được nghiên cứu thông qua áp dụng phương trình Gross-Pitaevskii [10] hay áp dụng phương trình động học Boltzmann [11]. Tuy nhiên, các kết quả thu được ở những công trình này chỉ giới hạn trong lý thuyết bán cổ điển và mới chỉ xem xét trong trường hợp coi khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống bằng nhau. Trong khi đó, một trong những yếu tố quan trọng ảnh hưởng đến sự hình thành exciton và do đó là hình thành polariton trong vi hốc là sự chênh lệch khối lượng hiệu dụng của điện tử dải dẫn và lỗ trống dải hóa trị. Thật vậy, 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 vật liệu bán kim loại/bán dẫn đã được khẳng định [12-17]. Tương tự, trong cấu trúc vi hốc, tác động của mất cân bằng khối lượng lên sự kết cặp điện tử - lỗ trống hình thành exciton và sự tán xạ polariton đã được khẳng định trong các công trình [18-20]. Tuy nhiên, trạng thái ngưng tụ của exciton và polariton chỉ xảy ra ở nhiệt độ hữu hạn. Còn khi nhiệt độ cao, năng lượng nhiệt lớn sẽ phá hủy mọi trạng thái liên kết và ngưng tụ. Chính vì vậy, việc khảo sát đồng thời ảnh hưởng của nhiệt độ và mất cân bằng khối lượng giữa điện tử và lỗ trống lên trạng thái ngưng tụ của hệ exciton-polariton là cần thiết.

Trong bài báo này, bằng việc áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn cho mô hình hai dải năng lượng có cả tương tác điện tử-photon và tương tác Coulomb, chúng tôi đã rút ra hệ phương trình tự hợp xác định các tham số trật tự trạng thái ngưng tụ. Trên cơ sở kết quả tính số, chúng tôi thiết lập các giản đồ pha thể hiện vai trò của nhiệt độ và sự mất cân bằng khối lượng điện tử-lỗ trống lên sự hình thành các trạng thái ngưng tụ trong hệ.

Bài báo được chia thành 4 phần. Trong đó, Hamiltonian của mô hình với các tính toán giải tích áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn được trình bày ở phần 2. Phần 3 trình bày các giản đồ pha được thiết lập từ kết quả tính số cùng các thảo luận chi tiết. Cuối cùng là kết luận của bài báo.

2. MÔ HÌNH LÝ THUYẾT VÀ TÍNH TOÁN GIẢI TÍCH

Hệ exciton-polariton-photon trong cấu trúc vi hốc được mô tả bởi mô hình hai dải năng lượng có tương tác Coulomb và tương tác điện tử/lỗ trống-photon với Hamiltonian trong không gian xung lượng có dạng sau

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}}^e e_{\mathbf{k}}^\dagger e_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}^h h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}}) - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger e_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger h_{\mathbf{k}'}, \quad (1)$$

$$+ \sum_{\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{q}} \phi_{\mathbf{q}}^\dagger \phi_{\mathbf{q}} - \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger h_{-\mathbf{k}}^\dagger \phi_{\mathbf{q}} + \phi_{\mathbf{q}}^\dagger e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} h_{-\mathbf{k}}),$$

Trong đó, hai số hạng ở hàng trên lần lượt biểu thị phần năng lượng tự do và năng lượng tương tác của hệ điện tử trên dải dẫn với toán tử hủy (sinh) điện tử $e_{\mathbf{k}}(e_{\mathbf{k}}^\dagger)$ và lỗ trống ở dải hóa trị với toán tử hủy (sinh) lỗ trống $h_{\mathbf{k}}(h_{\mathbf{k}}^\dagger)$ mang xung lượng $\mathbf{k}$. Ở đây, U là cường độ thế tương tác Coulomb giữa điện tử và lỗ trống, N là số nút mạng trong giếng lượng tử. Trong mô hình liên kết chặt với hệ hai chiều, các năng lượng tán sắc của điện tử và lỗ trống được cho bởi

$$E_{\mathbf{k}}^{e(h)} = -2t^{e(h)}(\cos k_x + \cos k_y) + \frac{\varepsilon_g + 8t^{e(h)} - \mu}{2}, \quad (2)$$

Với $t^{e(h)}$ là biên độ nhảy nút liền kề của điện tử (lỗ trống), tỉ lệ nghịch với khối lượng nên tỉ số t^h/t^e biểu thị mối tương quan về khối lượng hiệu dụng giữa điện tử và lỗ trống trong hệ. ε_g là khe năng lượng biểu thị khoảng cách từ đáy của dải dẫn tới đỉnh của dải hóa trị. Giá trị của ε_g sẽ cho biết hệ tồn tại ở pha bán kim loại ($\varepsilon_g < 0$) hay ở pha bán dẫn ($\varepsilon_g > 0$).

Số hạng đầu tiên ở hàng dưới trong Hamiltonian (1) biểu thị phần năng lượng photon với toán tử hủy (sinh) photon $\phi_{\mathbf{q}}(\phi_{\mathbf{q}}^\dagger)$ mang xung lượng $\mathbf{q}$. Năng lượng kích thích $\varepsilon_{\mathbf{q}}$ của photon phụ thuộc xung lượng $\mathbf{q}$ được cho dưới dạng sau

$$\varepsilon_{\mathbf{q}} = \sqrt{\mathbf{q}^2 + \varepsilon_c^2} - \mu, \quad (3)$$

Với ε_c là năng lượng của photon vi hốc tại điểm 0. μ là thế hóa học được lựa chọn để điều khiển tổng mật độ kích thích

$$n = n_{ph} + \frac{1}{2}(n_e + n_h), \quad (4)$$

Trong đó $n_{ph} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \phi_{\mathbf{k}}^\dagger \phi_{\mathbf{k}} \rangle$; $n_e = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle e_{\mathbf{k}}^\dagger e_{\mathbf{k}} \rangle$; $n_h = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle h_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}} \rangle$ lần lượt là mật độ photon, mật độ điện tử và mật độ lỗ trống.

Số hạng cuối cùng trong Hamiltonian (1) mô tả phần năng lượng tương tác giữa điện tử/lỗ trống - photon với hằng số tương tác g . Ảnh hưởng của phần năng lượng này lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ của hệ exciton - polariton - 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 $d = \varepsilon_c - \varepsilon_g$. Nếu tham số này lớn, dải năng lượng photon xen phủ mạnh với các dải năng lượng của điện tử và lỗ trống khiến cho sự đóng góp của photon trở nên không đáng kể.

Áp dụng gần đúng Hartree-Fock không giới hạn để giải Hamiltonian toàn phần trong phương trình (1), chúng tôi nhận được Hamiltonian hiệu dụng mà có thể được chéo hóa hoàn toàn viết dưới dạng toàn phương của các toán tử sinh và hủy

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{UHF} = & \sum_{\mathbf{k}} (\tilde{E}_{\mathbf{k}}^e e_{\mathbf{k}}^{\dagger} e_{\mathbf{k}} + \tilde{E}_{\mathbf{k}}^h h_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{\mathbf{k}}) \\ & + \Delta \sum_{\mathbf{k}} (e_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + h_{-\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}}) \\ & + \sum_{\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{q}} \phi_{\mathbf{q}}^{\dagger} \phi_{\mathbf{q}} + (\sqrt{N} \Gamma \phi_0^{\dagger} + H.c.),\end{aligned}\quad (5)$$

Trong đó các năng lượng kích thích điện tử và lỗ trống khi có dịch chuyển Hartree

$$\tilde{E}_{\mathbf{k}}^{e(h)} = E_{\mathbf{k}}^{e(h)} - U n_{h(e)}, \quad (6)$$

và

$$\Gamma = -gd, \quad (7)$$

Với $d = \sum_{\mathbf{k}} \langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle / N$ là đại lượng biểu thị sự lai hóa điện tử - lỗ trống. Chéo hóa Hamiltonian $\mathcal{H}_{UHF}$ chúng ta thu được tham số trật tự mô tả trạng thái ngưng tụ exciton-polariton trong hệ

$$\Delta = -\frac{g}{\sqrt{N}} \langle \phi_0 \rangle - Ud, \quad (8)$$

Với $\langle \phi_0 \rangle = -\sqrt{N} \Gamma / \varepsilon_0$. Khi tham số trật tự khác không thể hiện hệ tồn tại trong trạng thái ngưng tụ và ngược lại. Đặc biệt, tính chất của trạng thái ngưng tụ phụ thuộc vào sự cạnh tranh giữa tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton $\Delta_{eh} = -Ud$ và tham số trật tự trạng thái ngưng tụ photon $\Delta_{ph} = -\frac{g}{\sqrt{N}} \langle \phi_0 \rangle$.

Từ Hamiltonian chéo hóa hoàn toàn, chúng ta xác định được mật độ cặp điện tử - lỗ trống phụ thuộc xung lượng

$$\langle e_{\mathbf{k}}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle = [f^F(\epsilon_{\mathbf{k}}^1) - f^F(\epsilon_{\mathbf{k}}^2)] \frac{\text{sgn}(\tilde{E}_{\mathbf{k}}^h + \tilde{E}_{\mathbf{k}}^e) \cdot \Delta}{W_{\mathbf{k}}}, \quad (9)$$

Trong đó $f^F(\epsilon) = 1/(e^{\epsilon/T} + 1)$ là hàm phân bố Fermi-Dirac với T là nhiệt độ tuyệt đối và

$$W_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\tilde{E}_{\mathbf{k}}^h + \tilde{E}_{\mathbf{k}}^e)^2 + 4|\Delta|^2}. \quad (10)$$

Các năng lượng giả hạt mới được cho bởi

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{1(2)} = \frac{1}{2} [\tilde{E}_{\mathbf{k}}^h - \tilde{E}_{\mathbf{k}}^e \pm \text{sgn}(\tilde{E}_{\mathbf{k}}^h + \tilde{E}_{\mathbf{k}}^e) W_{\mathbf{k}}]. \quad (11)$$

Từ đây ta nhận được hệ phương trình tự hợp để xác định các tham số trật tự trạng thái ngưng tụ trong hệ.

Ảnh hưởng của nhiệt độ lên các trạng thái kết hợp trong hệ cũng được xem xét thông qua hàm phổ đơn hạt điện tử, lỗ trống và photon. Bằng cách viết phương trình chuyển động cho các hàm Green trễ của các điện tử dẫn, lỗ trống hóa trị và photon vi hóc, chúng tôi nhận được các hàm phổ đơn hạt lần lượt dưới dạng sau

$$A^e(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G^{re}(\mathbf{k}, \omega)] = u_{\mathbf{k}}^2 \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}^1) + v_{\mathbf{k}}^2 \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}^2), \quad (12)$$

$$A^h(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G^{rh}(\mathbf{k}, \omega)] = v_{\mathbf{k}}^2 \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}^1) + u_{\mathbf{k}}^2 \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}^2), \quad (13)$$

$$A^{ph}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G^{r\phi}(\mathbf{k}, \omega)] = \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}), \quad (14)$$

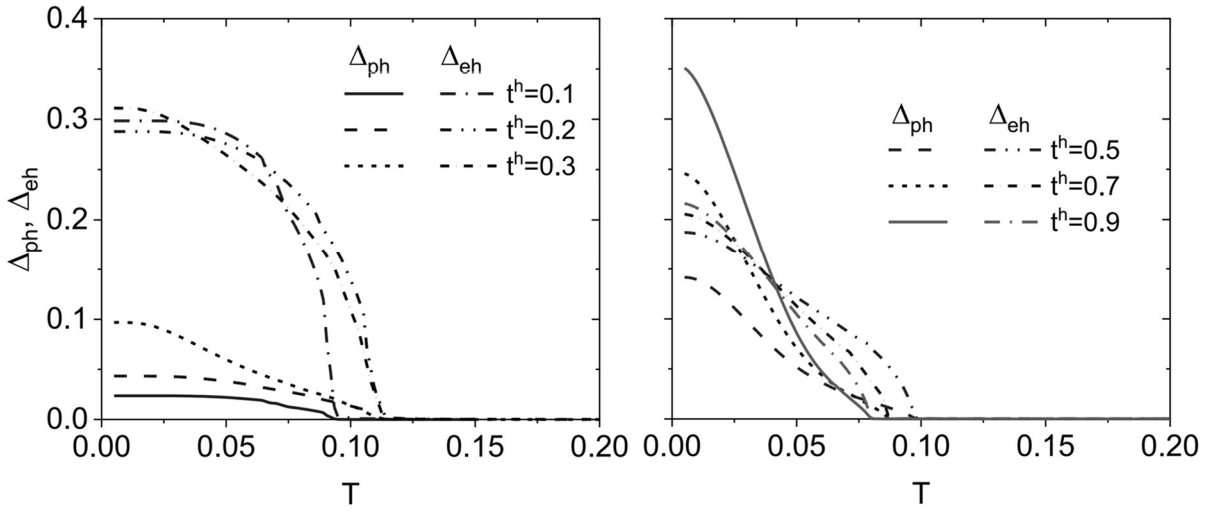
Trong đó

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \text{sgn}(\tilde{E}_{\mathbf{k}}^h + \tilde{E}_{\mathbf{k}}^e) \frac{\tilde{E}_{\mathbf{k}}^h + \tilde{E}_{\mathbf{k}}^e}{W_{\mathbf{k}}} \right], \quad (14)$$

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \text{sgn}(\tilde{E}_{\mathbf{k}}^h + \tilde{E}_{\mathbf{k}}^e) \frac{\tilde{E}_{\mathbf{k}}^h + \tilde{E}_{\mathbf{k}}^e}{W_{\mathbf{k}}} \right]. \quad (16)$$

3. KẾT QUẢ TÍNH SỐ VÀ THẢO LUẬN

Để mô tả ảnh hưởng của nhiệt độ và mất cân bằng khối lượng điện tử - lỗ trống lên sự hình thành trạng thái ngưng tụ exciton - polariton trong hệ, trong phần này, chúng tôi biểu thị các kết quả tính số các tham số trật tự Δ_{eh} và Δ_{ph} nhận được từ việc giải tự hợp các phương trình (6)-(10). Ở đây, chúng tôi sử dụng hệ hai chiều gồm $N = 200 \times 200$ nút mạng và chọn $t^e = 1$ là đơn vị của năng lượng. Khi đó tất cả các đại lượng đều được tính theo đơn vị của t^e . Với cách lựa chọn này, giá trị của biên độ nhảy nút t^h sẽ thể hiện sự chênh lệch khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống trong hệ. Chúng tôi cũng cố định năng lượng photon tại xung lượng không $\epsilon_c = 0.5$; tham số điều chỉnh $d = 1.0$; hằng số tương tác điện tử - photon và hằng số tương tác Coulomb lần lượt là $g = 0.2$ và $U = 2.0$.

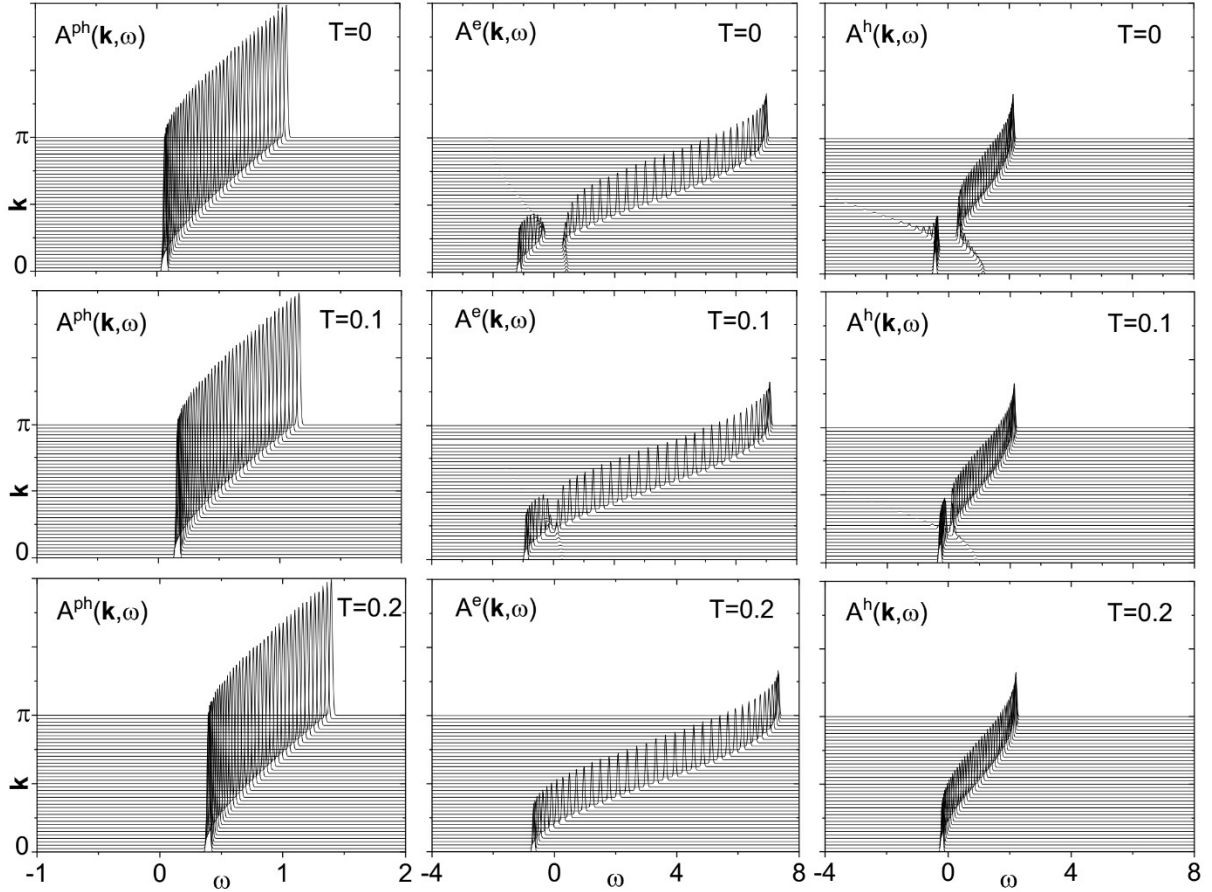


Hình 1. Sự phụ thuộc của tham số trật tự exciton Δ_{eh} và tham số trật tự photon Δ_{ph} vào nhiệt độ khi thay đổi biên độ nhảy nút t^h tại mật độ kích thích $n = 0.1$.

Trước tiên, chúng tôi biểu thị trên Hình 1 sự phụ thuộc của các tham số trật tự exciton và photon vào nhiệt độ T khi thay đổi biên độ nhảy nút của lỗ trống t^h . Kết quả cho thấy ứng với mỗi giá trị xác định của biên độ nhảy nút t^h , cả tham số trật tự exciton Δ_{eh} và tham số trật tự phonon Δ_{ph} đều khác không khi hệ được làm lạnh tới nhiệt độ đủ thấp dưới nhiệt độ tới hạn T_c . Chúng cũng đều tăng khi giảm biên độ nhảy nút t^h hay tăng mất cân bằng khối lượng điện tử - lỗ trống. Khi t^h nhỏ ($t^h \leq 0.3$), tức là khối lượng hiệu dụng của lỗ trống lớn hơn khối lượng hiệu dụng của điện tử nhiều, giản đồ cho thấy T_c tăng khi t^h tăng hay giảm mất cân bằng khối lượng. Giảm nhiệt độ từ giá trị tới hạn T_c , tham số trật tự exciton tăng nhanh hơn tham số trật tự photon và nhanh chóng đạt giá trị bão hòa. Điều đó thể hiện sự ổn định của trạng thái ngưng tụ exciton ở nhiệt độ đủ thấp. Tăng biên độ nhảy nút ($t^h \geq 0.5$), hình bên phải cho thấy nhiệt độ tới hạn T_c giảm khi tăng t^h . Giảm nhiệt độ từ giá trị tới hạn T_c , cả hai tham số trật tự đều tăng nhanh. Sự cạnh tranh phức tạp giữa hai tham số trật tự Δ_{eh} và Δ_{ph} có thể dẫn tới cấu trúc pha phức tạp của trạng thái ngưng tụ trong hệ mà chúng tôi sẽ biểu thị ở phần dưới đây.

Tiếp theo, chúng tôi biểu thị các hàm phổ đơn hạt đo phổ phát xạ quang của các hạt có vector sóng $\mathbf{k}$, từ đó xác định mật độ chiếm chỗ của các hạt đơn trong trạng thái liên kết lượng tử. Hình 2 biểu thị cường độ của các hàm phổ đơn hạt điện tử, lỗ trống và photon trong vùng Brillouin thứ nhất ứng với một vài nhiệt độ tại biên độ nhảy nút $t^h = 0.3$ và mật độ kích thích $n = 0.1$. Tại $T = 0$, sự phân bố trọng lượng phổ của các hàm phổ đơn hạt điện tử $A^e(\mathbf{k}, \omega)$ và lỗ trống $A^h(\mathbf{k}, \omega)$ biểu thị một khe năng lượng xuất hiện ở mức Fermi. Cấu trúc đỉnh đôi xung quanh mức Fermi cho thấy có hai trạng thái năng lượng khác nhau mà điện tử và lỗ trống có thể cùng tồn tại. Đây chính là dấu hiệu đặc trưng thể hiện sự lai hóa của điện tử và lỗ trống hình thành exciton. Trong khi đó, hàm phổ photon $A^{ph}(\mathbf{k}, \omega)$ có cấu trúc đỉnh đơn định xứ gần mức Fermi, đặc biệt với các xung lượng xung quanh $\mathbf{k} = 0$. Tăng nhiệt độ tới $T = 0.1$, năng lượng nhiệt phá hủy một phần trạng thái liên kết điện tử - lỗ trống làm cho trạng thái ngưng tụ bị suy yếu được thể hiện bởi sự giảm của bề rộng khe năng lượng. Hàm phổ photon mặc dù vẫn

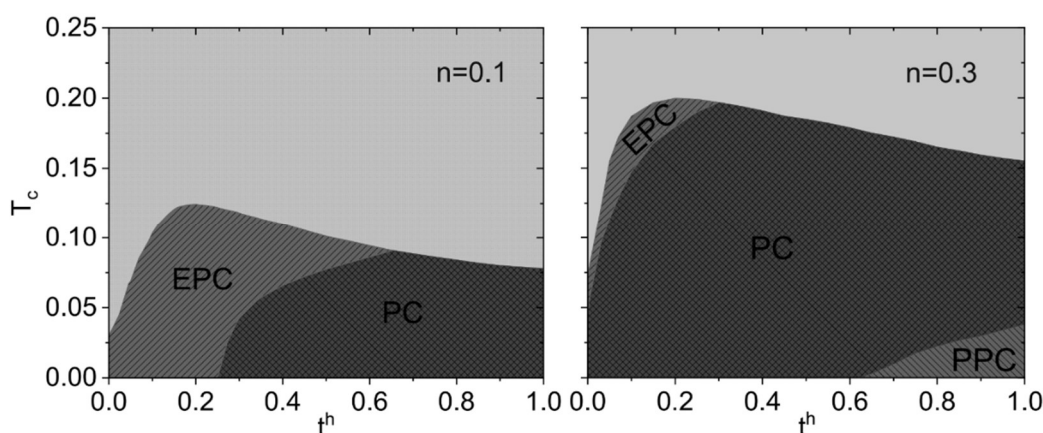
giữ cấu trúc đỉnh đơn nhưng dịch chuyển dần ra xa mức Fermi. Khi nhiệt độ cao ($T = 0.2$), sự phân bố trọng lượng phổ điện tử và lỗ trống gần như đồng đều và khe năng lượng biến mất. Điều đó thể hiện không có sự lai hóa giữa điện tử và lỗ trống, và cũng không có trạng thái kết hợp nào được thiết lập trong hệ điện tử - lỗ trống - photon khiến cho dải photon càng xa mức Fermi. Trạng thái ngưng tụ bị phá hủy hoàn toàn.



Hình 2. Hàm phổ đơn hạt của photon $A^{ph}(\mathbf{k}, \omega)$, điện tử $A^e(\mathbf{k}, \omega)$ và lỗ trống $A^h(\mathbf{k}, \omega)$ ứng với một vài giá trị của nhiệt độ tại biên độ nhảy nút $t^h = 0.3$ và mật độ kích thích $n = 0.1$.

Cuối cùng, để có một cái nhìn tổng quan về ảnh hưởng của nhiệt độ và mất cân bằng khối lượng điện tử - lỗ trống lên sự hình thành và cạnh tranh giữa các trạng thái ngưng tụ trong hệ, chúng tôi biểu thị trên Hình 3 giản đồ pha trạng thái ngưng tụ trong mặt phẳng $(t^h; T_c)$ tại mật độ kích thích $n = 0.1$ và $n = 0.3$. Giản đồ pha cho thấy trạng thái ngưng tụ của hệ chỉ được thiết lập ở nhiệt độ thấp. Tùy thuộc vào mối tương quan giữa các tham số trật tự Δ_{eh} và Δ_{ph} mà hệ có thể tồn tại trong trạng thái ngưng tụ exciton-polariton (EPC), polariton (PC) hay photon-polariton (PPC). Ở mật độ kích thích nhỏ ($n = 0.1$), hệ ổn định trong trạng thái ngưng tụ dạng EPC (vùng gạch chéo bên trái) với tỉ số $\Delta_{ph}/\Delta < 20\%$ khi t^h nhỏ hay mất cân bằng khối lượng lớn. Tăng t^h hay giảm mất cân bằng khối lượng, hệ chuyển sang trạng thái ngưng tụ PC (vùng kẻ ca-rô) với $20\% \leq \Delta_{ph}/\Delta \leq 80\%$. Thật vậy, khi t^h tăng hay khối lượng hiệu dụng của lỗ trống giảm càng gần với khối lượng hiệu dụng của điện tử làm cho lỗ trống linh động hơn. Dải lỗ

trống vì vậy càng gần với đáy của dải photon, các photon trở thành nhân tố chính đóng góp vào trạng thái kết hợp polariton và hệ sẽ chuyển dần từ trạng thái ngưng tụ dạng EPC sang trạng thái ngưng tụ dạng PC. Tăng mật độ kích thích ($n = 0.3$), vùng ngưng tụ EPC bị thu hẹp lại trong khi vùng ngưng tụ PPC (vùng gạch chéo bên phải) với $\Delta_{ph}/\Delta > 80\%$ được thiết lập ở mật cân bằng khối lượng thấp và vùng ngưng tụ PC trở nên chiếm ưu thế. Thật vậy, ở t^h lớn hay mật cân bằng khối lượng thấp, sự đóng góp của photon vào trạng thái liên kết polariton trở nên đáng kể và do đó trạng thái PPC được thiết lập khi tăng mật độ kích thích. Sự chuyển từ trạng thái ngưng tụ PC sang PPC khi tăng mật độ kích thích khá phù hợp với các quan sát thực nghiệm trong vi hốc giống lượng tử GaAs, trong đó sự gia tăng công suất kích thích dẫn đến sự chuyển đổi từ trạng thái PC sang trạng thái laser photon được đặc trưng bởi tỉ lệ exciton giảm dần [21, 22].



Hình 3. Giản đồ pha trạng thái ngưng tụ của hệ exciton-polariton-photon trong mặt phẳng ($t^h; T_c$) tại mật độ kích thích $n = 0.1$ và $n = 0.3$.

4. KẾT LUẬN

Trong khuôn khổ gần đúng Hartree-Fock không giới hạn, chúng tôi đã khảo sát sự hình thành trạng thái ngưng tụ của hệ exciton - polariton - photon trong vi hốc mật cân bằng khối lượng điện tử/lỗ trống dưới ảnh hưởng của nhiệt độ. Kết quả cho thấy hệ ổn định ở trạng thái ngưng tụ khi được làm lạnh đến nhiệt độ đủ thấp. Trong trạng thái ngưng tụ, quang phổ đơn hạt điện tử/lỗ trống biểu thị một khe năng lượng tại năng lượng Fermi và quang phổ đơn hạt photon có đỉnh gần mức Fermi. Tại mật độ kích thích nhất định, ngưng tụ polariton ở dạng EPC khi mật cân bằng khối lượng lớn và sau đó được thay thế bởi ngưng tụ dạng PC khi giảm mật cân bằng khối lượng. Ở mật độ kích thích thấp, ngưng tụ polariton được tìm thấy ngay cả khi khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống bằng nhau. Tăng mật độ kích thích sẽ phát triển các trạng thái ngưng tụ. Ngưng tụ dạng EPC bị thu hẹp lại ở mật cân bằng khối lượng lớn, trong khi ngưng tụ dạng PPC được thiết lập và mở rộng khi khối lượng điện tử và lỗ trống trở nên tương đương. Kết quả nghiên cứu của chúng tôi cung cấp một cái nhìn tổng quan về sự ngưng tụ của hệ exciton-polariton trong vi hốc mật cân bằng khối lượng điện tử-lỗ trống và làm rõ ảnh hưởng của nhiệt độ lên sự ổn định của các trạng thái ngưng tụ trong hệ. Những nghiên cứu kỹ lưỡng hơn về bản chất và tính chất động học của các trạng thái ngưng tụ sẽ là những nghiên cứu tiếp theo của chúng tôi trong tương lai.

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]. S. A. Moskalenko and D. W. Snoke, Bose-Einstein Condensation of Exciton and Biexcitons, Cambridge Univ. Press, Cambridge, (2000).
- [2]. C. Weisbuch, N. Nishioka, A. Ishikawa, Y. Arakawa. Observation of the coupled exciton-photon mode splitting in a semiconductor quantum microcavity, Phys. Rev. Lett. **69** (1992), 3314-3317.
- [3]. A. Rahimi-Iman, Polariton Physics, Springer, Switzerland, (2020).
- [4]. F. Xue *et al.*, Microscopic theory of equilibrium polariton condensates, Phys. Rev. B **94** (2016), 235302.
- [5]. M. V. Gurrieri *et al.*, Dynamics and condensation of polaritons in an optical nanocavity coupled to two-dimensional materials, Phys. Rev. B **109** (2024), 155432.
- [6]. A. S. Plyashechnik *et al.*, Coupled system of electrons and exciton-polaritons: Screening, dynamical effects, and superconductivity, Phys. Rev. B **108** (2023), 024513.
- [7]. V. N. Phan *et al.*, Ground-state and spectral signatures of cavity exciton-polariton condensates, Phys. Rev. B **93** (2016), 075138.
- [8]. D. H. Bui and V. N. Phan, Thermal fluctuations in a system of microcavity exciton-polariton condensations, Phys. Status Solidi B **254** (2017), 1600359.
- [9]. Q. H. Ninh and V. N. Phan, BCS-BEC crossovers of microcavity exciton-polariton condensates, Physica B **573** (2019), 72.
- [10]. T. D. Doan, D. B. Tran Thoai, and H. Haug, Kinetics and luminescence of the excitations of a nonequilibrium polariton condensate, Phys. Rev. B **102** (2020), 165126.
- [11]. N. D. Chinh *et al.*, Effect of magnetic field on the Bose-Einstein condensation of quantum well exciton-polaritons, Solid State Commun. **394** (2024), 115690.
- [12]. P. Farkasovsky, Formation and condensation of excitonic bound states in the generalized Falicov-Kimball model, Phys. Rev. B **95** (2017), 045101.
- [13]. P. Farkasovsky, DMRG study of exciton condensation in the extended Falicov-Kimball model, Condens. Matter Phys. **23** (2020), 43709.
- [15]. T. H. H. Do and V. N. Phan, Electron-phonon correlations inducing excitonic excitations in semimetal and semiconducting materials, Phys. Rev. B **107** (2023), 115106.
- [16]. T. H. H. Do, T. H. Nguyen, and V.-N. Phan, Mass imbalance and electron-phonon correlation impact on the excitonic insulator state in semimetal/semiconducting materials, Phys. Rev. B **109** (2024), 085105.

- [17]. T. H. H. Do and V. N. Phan, Thermal fluctuations and mass imbalance in low-energy excitonic condensate excitations, *Phys. Rev. B* **110** (2024), 235143.
- [18]. G. Li, M. M. Parish, and J. Levinsen, Microscopic calculation of polariton scattering in semiconductor microcavities, *Phys. Rev. B* **104** (2021), 245404.
- [19]. A. Tienne *et al.*, Extremely imbalanced two-dimensional electron-hole-photon systems. *Phys. Rev. Res.* **2** (2020), 023089.
- [20]. A. Tienne, Charged Polaritons in Two-Dimensional Semiconductors. Ph.D. thesis, Universidad Autonoma de Madrid, (2023).
- [21]. H. Cao *et al.*, Transition from a microcavity exciton polariton to a photon laser, *Phys. Rev. A* **55** (1997), 4632.
- [22]. M. Klaas *et al.*, Photon-number-resolved measurement of an exciton-polariton condensate, *Phys. Rev. Lett.* **121** (2018), 047401.