

INFLUENCE OF THE ELECTRONIC MOBILITY ON THE EXCITONIC INSULATOR STATE IN RARE-EARTH CHALCOGENIDES

Nguyen Thi Hau¹, Le Tien Ha², Do Thi Hong Hai^{1*}

¹ Hanoi University of Mining and Geology

² TNU – University of Sciences

ARTICLE INFO	ABSTRACT
Received: 08/10/2021	The influence of the electronic mobility on the excitonic insulator state in the rare-earth chalcogenides was investigated through the extended Falicov–Kimball model. By applying the Hartree-Fock approximation, we have obtained a set of self-consistent equations determining expectation values and the excitonic susceptibility function in the model. We have considered the effect of the electronic mobility on the excitonic insulator state via analyzing the excitonic susceptibility function. The results confirm the role of the f-electron mobility in the formation of the excitonic insulator state in rare-earth chalcogenides at sufficiently low temperature when the external pressure is large enough.
Revised: 09/11/2021	
Published: 10/11/2021	
KEYWORDS	
The extended Falicov–Kimball model	
Hartree-Fock approximation	
Excitonic insulator	
The rare-earth chalcogenide	
Excitonic susceptibility	

ẢNH HƯỞNG CỦA ĐỘ LINH ĐỘNG CỦA ĐIỆN TỬ LÊN TRẠNG THÁI ĐIỆN MÔI EXCITON TRONG CÁC HỢP CHẤT ĐẤT HIẾM CHALCOGENIDE

Nguyễn Thị Hậu¹, Lê Tiến Hà², Đỗ Thị Hồng Hải^{1*}

¹Trường Đại học Mỏ - Địa chất

²Trường Đại học Khoa học – ĐH Thái Nguyên

THÔNG TIN BÀI BÁO	TÓM TẮT
Ngày nhận bài: 08/10/2021	Ảnh hưởng của độ linh động điện tử lên trạng thái điện môi exciton trong các hợp chất đất hiếm chalcogenide được chúng tôi khảo sát thông qua mô hình Falicov–Kimball mở rộng. Bằng việc áp dụng gần đúng Hartree-Fock để tính toán giải tích, chúng tôi thu được hệ phương trình tự hợp xác định hàm cảm ứng exciton thông qua các tham số của mô hình. Từ các kết quả đó, chúng tôi đã thiết lập chương trình tính số để khảo sát sự phụ thuộc của hàm cảm ứng exciton tính vào nhiệt độ và áp suất ngoài khi thay đổi tích phân nhảy nút t^f của điện tử f. Các kết quả khẳng định vai trò của mức độ linh động của điện tử f trong việc hình thành trạng thái điện môi exciton trong các hợp chất đất hiếm chalcogenide ở nhiệt độ đủ thấp và áp suất ngoài đủ lớn.
Ngày hoàn thiện: 09/11/2021	
Ngày đăng: 10/11/2021	
TỪ KHÓA	
Mô hình Falicov-Kimball mở rộng	
Gần đúng Hartree-Fock	
Điện môi exciton	
Đất hiếm chalcogenide	
Hàm cảm ứng exciton	

DOI: <https://doi.org/10.34238/tnu-jst.5132>

* Corresponding author. Email: dothihonghai@humg.edu.vn

1. Mở đầu

Kim loại đất hiếm và hợp chất của chúng được ứng dụng chủ yếu trong hai lĩnh vực mũi nhọn, đó là công nghiệp và quốc phòng. Chúng cũng ngày càng được sử dụng nhiều trong các thiết bị hàng ngày phục vụ đời sống hiện đại của con người như: bộ nhớ máy tính, đĩa quang, pin sạc, điện thoại di động, bộ chuyển đổi xúc tác, nam châm, pin mặt trời... Để có thể khai thác triệt để tiềm năng ứng dụng của các loại vật liệu này, việc tìm hiểu về tính chất, đặc điểm hay cơ chế chuyển pha của chúng là rất cần thiết.

Exciton là trạng thái kết cặp điện tử - lỗ trống nhờ tương tác Coulomb, tồn tại trong nhiều vật liệu, ngay cả trong Si. Ở nhiệt độ đủ thấp, exciton có thể tồn tại trong một trạng thái lượng tử và chuyển cấu hình của bán kim loại hoặc bán dẫn sang trạng thái điện môi tương ứng, gọi là trạng thái điện môi exciton (Excitonic insulator – EI). Trạng thái này được đề xuất về mặt lý thuyết từ hơn 60 năm trước [1]. Tuy nhiên cho đến nay, trạng thái EI vẫn đang thu hút sự tập trung nghiên cứu trong cả lý thuyết [2]-[6] và thực nghiệm [7]-[9]. Trạng thái EI rất hiếm gặp trong tự nhiên vì trong hầu hết các vật liệu, thời gian sống của exciton thường rất ngắn so với thăng giáng nhiệt. Do đó, việc tìm ra các hệ vật liệu mà exciton có thể tồn tại trong thời gian đủ lớn để đạt trạng thái ngưng tụ là hết sức cần thiết. Một trong những hệ vật liệu triển vọng để quan sát trạng thái EI chính là hợp chất đất hiếm chalcogenide. Chẳng hạn như trong vật liệu $\text{TmSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$, người ta nhận thấy một trạng thái liên kết exciton của lỗ trống $4f$ và điện tử $5d$ có thể được tạo thành. Tại nhiệt độ đủ thấp và áp suất trong khoảng từ 5 - 13kbar, những exciton đó ngưng tụ trong trạng thái EI [10], [11]. Với tiềm năng ứng dụng trong công nghệ, việc khảo sát kỹ lưỡng về các yếu tố ảnh hưởng đến chuyển pha trạng thái EI trong các hệ vật liệu này đang rất được quan tâm nghiên cứu.

Trong số các mô hình lý thuyết thường được sử dụng để khảo sát trạng thái EI, mô hình Falicov-Kimball mở rộng (Extended Falicov-Kimball model – EFKM) là mô hình tiêu biểu và thường được sử dụng nhiều nhất [12]-[14]. Mô hình Falicov-Kimball nguyên gốc mô tả tương tác giữa điện tử linh động c và điện tử định xứ f bởi tương tác Coulomb [15]. Còn mô hình EFKM bao gồm sự nhảy trực tiếp điện tử dài c và dài f , hay là mô hình có tính tới nhảy nút của điện tử trên mức f ; và thừa nhận sự kết cặp của điện tử c với điện tử f thông qua tương tác Coulomb.

Trong bài báo này, chúng tôi áp dụng phương pháp gần đúng Hartree-Fock trong mô hình EFKM để khảo sát ảnh hưởng của mức độ linh động của điện tử f lên sự hình thành trạng thái EI trong các hợp chất pha trộn đất hiếm chalcogenide. Các nghiên cứu chúng tôi đã thực hiện trước đây về chuyển pha trạng thái EI hoàn toàn dựa trên cơ sở khảo sát tính chất của tham số trật tự trạng thái ngưng tụ [16]-[20]. Tuy nhiên, trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu chuyển pha trạng thái EI trong hệ thống qua khảo sát tính chất của hàm cảm ứng exciton.

Trong phần 2 của bài báo, chúng tôi trình bày mô hình EFKM và áp dụng phương pháp gần đúng Hartree-Fock để rút ra hệ phương trình xác định hàm cảm ứng exciton. Phần 3 của bài báo trình bày các kết quả tính số và các kết luận được trình bày trong phần 4.

2. Mô hình và tính toán lý thuyết

Trong không gian xung lượng, Hamiltonian của mô hình EFKM có dạng sau:

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

Trong đó, hai số hạng đầu mô tả năng lượng của hệ điện tử c ở dải dẫn và điện tử f ở dải hóa trị khi không tương tác với $c_{\mathbf{k}}^\dagger (c_{\mathbf{k}})$ và $f_{\mathbf{k}}^\dagger (f_{\mathbf{k}})$, tương ứng là toán tử sinh (hủy) của các điện tử c và điện tử f không spin mang xung lượng $\mathbf{k}$. Trong gần đúng liên kết chặt, các năng lượng kích thích điện tử c và f được cho bởi

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

Với $\varepsilon_k^{c(f)}$ là năng lượng trên một nút của điện tử c và điện tử f . Sự khác nhau của hai giá trị năng lượng này cho mức độ xen phủ của hai dải năng lượng. $t^{c(f)}$ là tích phân nhảy nút tương ứng của điện tử c và điện tử f , thể hiện độ linh động của các điện tử c, f . Thông thường $t^f < t^c$ thể hiện điện tử f kém linh động hơn điện tử c . Trong mạng tinh thể hai chiều hình vuông với hằng số mạng $a = 1$, ta có $\gamma_k = 2(\cos k_x + \cos k_y)$ là bước nhảy trong mạng tinh thể và μ là thế hóa học.

Số hạng cuối cùng trong phương trình (1) mô tả tương tác Coulomb giữa điện tử trên dải dẫn và điện tử ở dải hóa trị với cường độ thế tương tác Coulomb là U , trong đó N là số nút mạng tinh thể. Ở đây, chúng tôi xem như ghép cặp điện tử $c - f$ tương đương với một trạng thái exciton.

Áp dụng gần đúng Hartree-Fock, chúng tôi viết lại toán tử tương tác Coulomb trong phương trình (1) và thực hiện phép tính gần đúng để bỏ qua những hằng số xuất hiện trong toán tử tương tác Coulomb. Từ đó, chúng tôi thu được Hamiltonian Hartree-Fock như sau:

$$\mathcal{H}_{HF} = \sum_k \bar{\varepsilon}_k^c c_k^\dagger c_k + \sum_k \bar{\varepsilon}_k^f f_k^\dagger f_k + \Lambda \sum_k (c_{k+q}^\dagger f_k + f_k^\dagger c_{k+q}) \quad (3)$$

Trong đó, $\bar{\varepsilon}_k^c$ và $\bar{\varepsilon}_k^f$ là các năng lượng tán sắc tái chuẩn hóa khi có đóng góp của độ dịch Hartree-Fock có dạng:

$$\bar{\varepsilon}_k^{c(f)} = \varepsilon_k^{c(f)} + U n^{f(c)} \quad (4)$$

Với $n^f = \frac{1}{N} \sum_k \langle f_k^\dagger f_k \rangle$; $n^c = \frac{1}{N} \sum_k \langle c_k^\dagger c_k \rangle$ tương ứng là mật độ điện tử c và mật độ điện tử f được xác định bởi hàm phân bố Fermi-Dirac $f^F(\epsilon)$ như sau:

$$\begin{aligned} \langle c_k^\dagger c_k \rangle &= f^F(\bar{\varepsilon}_k^c) \\ \langle f_k^\dagger f_k \rangle &= f^F(\bar{\varepsilon}_k^f) \end{aligned} \quad (5)$$

Với $f^F(\epsilon) = (1 + e^{\beta\epsilon})^{-1}$, trong đó $\beta = 1/T$ là nghịch đảo của nhiệt độ.

Trong phương trình (3), Λ được xác định bởi: $\Lambda = -\frac{U}{N} \sum_k \langle c_{k+q}^\dagger f_k \rangle$ (6)

có chứa số hạng đặc trưng cho sự lai hóa của điện tử c và điện tử f , được xem là tham số trật tự trạng thái ngưng tụ exciton.

Bằng việc chéo hóa Hamiltonian trong phương trình (3), chúng tôi xác định được các giá trị kì vọng, từ đó thu được hệ các phương trình tự hợp xác định tham số trật tự trạng thái EI. Việc khảo sát chi tiết tham số trật tự để mô tả chuyển pha trạng thái EI đã được chúng tôi trình bày trong các bài báo [15]-[19]. Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu sự hình thành trạng thái EI thông qua khảo sát tính chất của hàm cảm ứng exciton.

Hàm cảm ứng exciton trong không gian xung lượng được xác định bởi

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \langle f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}; c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}'} \rangle \rangle_{(\omega)} \quad (7)$$

Để tính hàm cảm ứng exciton, chúng tôi sử dụng Hamiltonian (1) để viết phương trình chuyển động cho hàm Green hai hạt dưới dạng sau:

$$\begin{aligned} &\omega \langle \langle f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}; c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}'} \rangle \rangle_{(\omega)} \\ &= \langle \langle f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}; c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}'} \rangle \rangle \\ &+ \langle \langle [f_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, \mathcal{H}]; c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger f_{\mathbf{k}'} \rangle \rangle_{(\omega)} \end{aligned} \quad (8)$$

Thay Hamiltonian trong phương trình (1) vào (8) và sử dụng gần đúng pha ngẫu nhiên để tính toán, chúng tôi thu được:

$$\begin{aligned} & (\omega - \omega_k^{cf}(\mathbf{q})) \left\langle \left\langle f_k^\dagger c_{k+q}; c_{k+q}^\dagger f_{k'} \right\rangle \right\rangle_{(\omega)} \\ &= \left(\langle n_k^f \rangle - \langle n_{k+q}^c \rangle \right) - \frac{U}{N} \left(\langle n_k^f \rangle - \langle n_{k+q}^c \rangle \right) \\ & \times \sum_{k_2} \left\langle \left\langle f_{k_2}^\dagger c_{k_2+q}; c_{k_2+q}^\dagger f_{k'} \right\rangle \right\rangle_{(\omega)} \end{aligned} \quad (9)$$

Với $\omega_k^{cf}(\mathbf{q}) = \bar{\varepsilon}_{k+q}^c - \bar{\varepsilon}_k^f$

Lấy tổng hai vế phương trình (9) theo $\mathbf{k}$ và thay tổng $\mathbf{k}$ với $\mathbf{k}_2$, chúng tôi thu được hàm cảm ứng exciton:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 + U \chi^0(\mathbf{q}, \omega)} \quad (10)$$

Trong đó:

$$\chi^0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle n_{\mathbf{k}}^f \rangle - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^c \rangle}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}^{cf}(\mathbf{q})} \quad (11)$$

Với $\langle n_{\mathbf{k}}^f \rangle = \langle f_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}} \rangle$ và $\langle n_{\mathbf{k}}^c \rangle = \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle$ được xác định trong phương trình (5).

Ở đây, chúng tôi mô tả chuyển pha trạng thái EI trong mô hình thông qua khảo sát hàm cảm ứng exciton khi $\omega = 0$ hay còn gọi là hàm cảm ứng exciton tĩnh. Chúng tôi cũng xét các exciton có xung lượng khối tâm $\mathbf{q} = 0$ tham gia vào hình thành pha EI. Do đó, trong bài báo này, chúng tôi xem xét tính chất của hàm cảm ứng exciton tĩnh $\chi_0 = \chi(\mathbf{0}, 0)$.

3. Kết quả và thảo luận

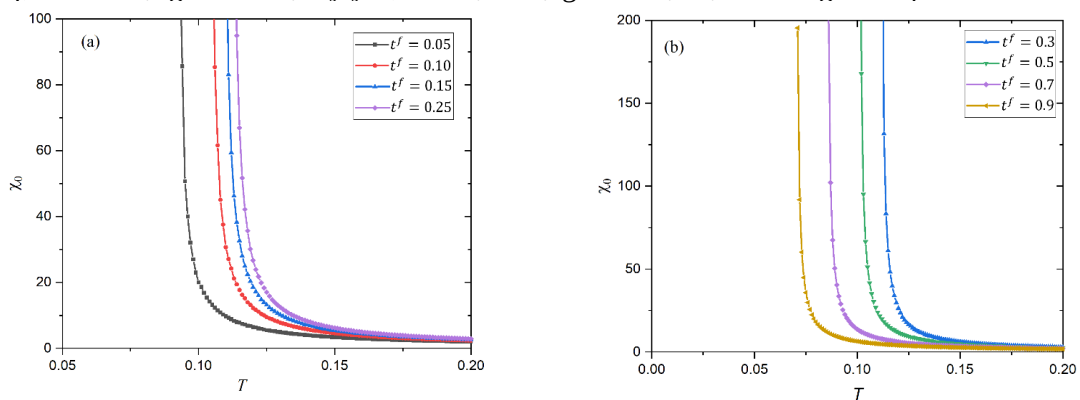
Trong phần này, chúng tôi trình bày kết quả tính số để thảo luận ảnh hưởng của độ linh động t^f của điện tử f lên trạng thái EI trong các hợp chất đất hiếm chalcogenide thông qua mô hình EFKM. Hàm cảm ứng exciton thể hiện sự thăng giáng exciton trong hệ, do đó sự tồn tại của trạng thái EI được thể hiện bởi sự phân kỳ của hàm cảm ứng exciton. Chú ý rằng, trong bài báo này chúng tôi chỉ xét hàm cảm ứng exciton tĩnh $\chi_0 = \chi(\mathbf{0}, 0)$.

Để thực hiện tính số, trên cơ sở kết quả phép tính giải tích ở phần trước, chúng tôi thiết lập chương trình tính số để thu được kết quả của hàm cảm ứng exciton tĩnh. Bằng việc giải tự hợp các phương trình (4)-(5), ta tìm được các mật độ hạt và năng lượng tán sắc của điện tử, từ đó xác định được hàm cảm ứng theo các phương trình (10)-(11). Nghiệm của quá trình giải số tự hợp nhận được khi sai số tương đối của tất cả các đại lượng giữa hai vòng lặp liên tiếp nhỏ hơn 10^{-12} . Ở đây, chúng tôi chọn hệ đơn vị tự nhiên với $\hbar = c = k_B = 1$ và tính toán cho hệ hai chiều gồm $N = 500 \times 500$ nút mạng. Không làm mất tính tổng quát, chúng tôi chọn $t^c = 1$ coi là đơn vị của năng lượng, còn t^f luôn được chọn sao cho $t^f < t^c$ để phù hợp với trạng thái của hệ điện tử trong hợp chất đất hiếm chalcogenide $\text{TmSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$.

Trong các nghiên cứu trước đây [11], [15], chúng tôi thấy rằng trạng thái EI chỉ được thiết lập khi cường độ thể tương tác Coulomb và áp suất ngoài đủ lớn. Do đó, trong bài báo này chúng tôi khảo sát hàm cảm ứng exciton tĩnh phụ thuộc vào nhiệt độ T ứng với một vài giá trị khác nhau của tích phân nhảy nút t^f (Hình 1) khi cố định cường độ thể tương tác Coulomb $U = 2,5$ và mức độ xen phủ của hai dải năng lượng điện tử $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 1,5$.

Giản đồ pha trên Hình 1 cho thấy, ứng với mỗi giá trị của t^f , hàm cảm ứng exciton tĩnh tăng dần khi giảm nhiệt độ. Ở vùng nhiệt độ thấp, hàm cảm ứng exciton tĩnh tăng mạnh và phân kỳ khi

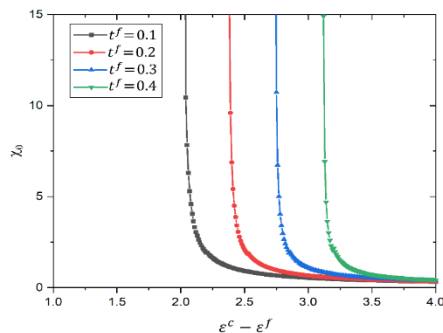
nhệt độ tiến tới một giá trị tới hạn, giá trị này gọi là nhiệt độ chuyển pha trạng thái EI (T_{EI}). Thực vậy, khi nhiệt độ lớn hơn nhiệt độ tới hạn, năng lượng nhiệt lớn làm phá hủy trạng thái liên kết của điện tử c và điện tử f hình thành exciton, mọi trạng thái liên kết exciton đều bị phá vỡ, do đó trạng thái EI bị suy yếu và hệ chuyển sang trạng thái lỏng của điện tử. Ứng với các giá trị t^f nhỏ ($t^f \leq 0.25$) trên Hình 1a, nhiệt độ tới hạn T_{EI} tăng khi t^f tăng. Ngược lại, ứng với các giá trị t^f lớn ($t^f \geq 0.3$) trên Hình 1b, nhiệt độ tới hạn T_{EI} giảm khi t^f tăng. Có thể thấy, ứng với các giá trị t^f nhỏ, tức là điện tử f gần như định xứ, hệ ở trong pha bán dẫn, trạng thái EI chỉ được hình thành ở nhiệt độ tới hạn T_{EI} khi cường độ thể tương tác Coulomb đủ lớn. Khi t^f tăng hay điện tử f càng linh động, dẫn tới tăng khả năng ghép cặp của điện tử c - f hình thành exciton, thể hiện ở sự tăng nhiệt độ T_{EI} trên giản đồ pha Hình 1a. Tuy nhiên, nếu tiếp tục tăng t^f , hệ dần chuyển sang pha bán kim loại, trong trường hợp này nếu độ linh động của điện tử f tăng sẽ làm phá hủy liên kết điện tử c - f , dẫn tới trạng thái EI bị suy yếu, thể hiện ở sự giảm nhiệt độ T_{EI} trên giản đồ pha Hình 1b.



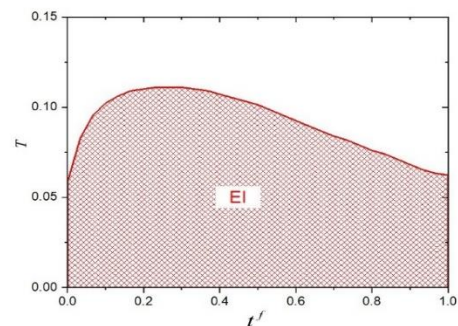
Hình 1. Hàm cảm ứng exciton tĩnh χ_0 phụ thuộc nhiệt độ T ứng với một vài giá trị của t^f

Từ các kết quả trên Hình 1, chúng tôi tiếp tục khảo sát ảnh hưởng của áp suất ngoài và độ linh động của điện tử f lên sự hình thành trạng thái EI trong trạng thái cơ bản, tức là tại nhiệt độ $T = 0$ và vẫn giữ cố định cường độ thể tương tác Coulomb $U = 2,5$, kết quả được thể hiện trên Hình 2.

Giản đồ pha trên Hình 2 thể hiện sự phụ thuộc của hàm cảm ứng exciton tĩnh vào mức độ xen phủ của hai dải năng lượng ứng với các giá trị khác nhau của t^f khi $U = 2,5$. Mức độ xen phủ của các dải năng lượng thể hiện ảnh hưởng của áp suất ngoài tác dụng lên hệ. Khi $\varepsilon^c - \varepsilon^f$ tăng ứng với việc giảm mức độ xen phủ của hai dải năng lượng hay giảm áp suất ngoài tác động lên hệ và ngược lại.



Hình 2. Hàm cảm ứng exciton tĩnh χ_0 phụ thuộc vào $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 1,5$ ứng với một vài giá trị của t^f



Hình 3. Giản đồ pha trạng thái EI trong mặt phẳng $(t^f - T)$ khi $U = 2,5$ và $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 1,5$. Pha EI được chỉ ra bởi vùng kẻ caro

Kết quả trên giản đồ Hình 2 cho thấy, tại nhiệt độ $T = 0$, với t^f xác định, hàm cảm ứng exciton tĩnh có giá trị rất nhỏ ở áp suất thấp, tức là khi dải c và f tách xa nhau. Khi $\varepsilon^c - \varepsilon^f$ giảm, hàm cảm ứng tăng dần và phân kì khi mức độ xen phủ các dải năng lượng đạt tới một giá trị tới hạn, hay áp suất ngoài tác động lên hệ tăng đến một giá trị tới hạn đủ lớn. Hệ khi đó tồn tại trong trạng thái EI. Thật vậy, điều này có thể được giải thích theo cấu trúc vùng năng lượng, khi $\varepsilon^c - \varepsilon^f$ giảm, mặt Fermi dần được mở rộng, tức là xen phủ giữa dải f và dải c tăng lên, do đó làm tăng khả năng ghép cặp điện tử $c - f$ hình thành trạng thái kết hợp của exciton. Với $U = 2,5$, do sự dịch chuyển Hartree, khi t^f còn nhỏ, hệ ở trong pha bán dẫn. Do đó, khi tăng t^f , tức là tăng độ linh động của điện tử f , làm tăng cường khả năng kết cặp điện tử $c - f$, vì vậy áp suất ngoài tới hạn tác động lên hệ để hình thành trạng thái EI giảm. Rõ ràng, ứng với mọi giá trị của t^f trong miền khảo sát, hệ chỉ tồn tại trong trạng thái EI khi áp suất ngoài đủ lớn. Điều này hoàn toàn phù hợp với kết quả thực nghiệm trên vật liệu $\text{TmSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$ [21]. Khi áp suất đủ lớn, các dải $4f$ và $5d$ xen phủ nhau, các điện tử f kết cặp với các điện tử $5d$ để tạo thành các exciton và có thể ngưng tụ ở nhiệt độ thấp.

Để tóm tắt, trên Hình 3 chúng tôi biểu thị giản đồ pha trạng thái EI trong hệ trong mặt phẳng $(t^f - T)$ khi $U = 2,5$ và $\varepsilon^c - \varepsilon^f = 1,5$.

Trong trường hợp này, với t^f còn nhỏ, hệ ở trong pha bán dẫn với dải c và dải f tách xa nhau. Rõ ràng là, ứng với một giá trị xác định của t^f , ta luôn tìm được vùng ngưng tụ exciton (biểu thị bởi vùng kẻ caro) ở nhiệt độ nhỏ hơn nhiệt độ tới hạn T_{EI} . Khi thay đổi t^f tức là thay đổi độ linh động của điện tử f , vì vậy có thể ảnh hưởng tới trạng thái liên kết của exciton. Thật vậy, trong pha bán dẫn, tăng t^f làm tăng độ linh động của điện tử f , do đó làm tăng khả năng ghép cặp điện tử $c - f$ hình thành exciton. Vì vậy nhiệt độ chuyển pha trạng thái EI tăng lên. Nếu tiếp tục tăng t^f , hệ dần chuyển sang pha bán kim loại. Trong trường hợp này, điện tử f càng linh động sẽ phá hủy trạng thái kết cặp điện tử $c-f$, do đó trạng thái EI bị suy yếu. Điều đó được thể hiện bởi sự giảm giá trị của nhiệt độ tới hạn T_{EI} khi t^f tăng lên. Kết quả này hoàn toàn phù hợp với kết quả khảo sát sự phụ thuộc của tham số trật tự vào nhiệt độ khi thay đổi độ linh động của điện tử f trong hệ bán kim loại với mô hình hai dải chỉ có tương tác điện tử - phonon [22]. Nếu t^f càng lớn, hệ có thể sẽ chuyển sang trạng thái kim loại và nhiệt độ T_{EI} sẽ càng giảm. Ở nhiệt độ đủ thấp dưới nhiệt độ tới hạn T_{EI} và độ linh động của điện tử f phù hợp, hệ ổn định trong trạng thái EI. Khi nhiệt độ lớn hơn nhiệt độ tới hạn, năng lượng nhiệt lớn làm phá hủy trạng thái liên kết của điện tử $c - f$ hình thành exciton, do đó hệ tồn tại trong trạng thái lỏng của điện tử.

4. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã khảo sát ảnh hưởng của độ linh động điện tử lên trạng thái điện môi exciton trong các hợp chất đất hiếm chalcogenide thông qua khảo sát hàm cảm ứng exciton trong mô hình Falicov–Kimball mở rộng. Trong phần tính toán giải tích, chúng tôi đã thu được hệ các phương trình tự hợp chứa các tham số của mô hình và hàm cảm ứng exciton. Từ các kết quả đó, chúng tôi đã thiết lập chương trình tính số để khảo sát sự phụ thuộc của hàm cảm ứng exciton tĩnh vào nhiệt độ và áp suất ngoài khi thay đổi tích phân nhảy nút t^f của điện tử f . Các kết quả tính số cho thấy, trong toàn miền giới hạn t^f của hợp chất đất hiếm chalcogenide, hệ ổn định trong trạng thái EI khi nhiệt độ nhỏ hơn giá trị nhiệt độ chuyển pha T_{EI} , thể hiện bởi sự phân kì của hàm cảm ứng exciton. Khi hệ ở trong pha bán dẫn, T_{EI} tăng khi t^f tăng. Còn trong pha bán kim loại, T_{EI} giảm khi t^f tăng. Sự thay đổi của nhiệt độ tới hạn cho chuyển pha trạng thái EI theo t^f cũng được thể hiện rõ nét trong giản đồ pha trạng thái EI trong mặt phẳng $(t^f - T)$. Bên cạnh đó, kết quả khảo sát hàm cảm ứng theo mức độ xen phủ của các dải năng lượng cũng khẳng định với giá trị xác định của độ linh động của điện tử f , ta luôn tìm thấy trạng thái EI khi áp suất ngoài đủ lớn. Tăng độ linh động của điện tử f , áp suất ngoài tới hạn tác động lên hệ để hình thành trạng thái EI giảm. Kết quả của bài báo rõ ràng cho ta cơ sở để hiểu rõ vai trò của độ linh động của điện tử f trong việc hình thành trạng

thái EI quanh điểm chuyển pha. Những khảo sát chi tiết hơn khi xét đến cả ảnh hưởng của tương tác điện tử - phonon 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 Mỏ - Địa chất, trong đề tài mã số T21-07.

TÀI LIỆU THAM KHẢO/ REFERENCES

- [1] N. F. Mott, "The transition to the metallic state," *Philosophical Magazine*, vol. 6, pp. 287-309, 1961.
- [2] G. Wang, A. Chernikov, M. M. Glazov, T. F. Heinz, X. Marie, T. Amand, and B. Urbaszek, "Colloquium: Excitons in atomically thin transition metal dichalcogenides," *Reviews of Modern Physics*, vol. 90, 2018, Art. no. 021001.
- [3] F. Katsch, M. Selig, and A. Knorr, "Exciton-Scattering-Induced Dephasing in Two-Dimensional Semiconductors," *Physical Review Letters*, vol. 124, 2020, Art. no. 257402.
- [4] H. Yu and W. Yao, "Luminescence anomaly of dipolar valley excitons in homobilayer semiconductor moiré superlattices," *Physical Review X*, vol. 11, 2021, Art. no. 021042.
- [5] J. C. G. Henriques, N. A. Mortensen, and N. M. R. Peres, "Analytical description of the 1s-exciton linewidth temperature-dependence in transition metal dichalcogenides," *Physical Review B*, vol. 103, 2021, Art. no. 235402.
- [6] H. Liu, A. Pau, and D. K. Efimkin, "Hybrid dark excitons in monolayer MoS₂," *Physical Review B*, vol. 104, 2021, Art. no. 165411.
- [7] M. Förg, L. Colombier, R. K. Patel, J. Lindlau, A. D. Mohite, H. Yamaguchi, D. Hunger, and A. Högele, "Cavity-control of bright and dark interlayer excitons in van der Waals heterostructures," *Nature Communications*, vol. 10, 2019, Art. no. 3697.
- [8] F. Wang, C. Wang, A. Chaves, C. Song, G. Zhang, A. Huang, Y. Lei, Q. Xing, L. Mu, Y. Xie, and H. Yan, "Prediction of hyperbolic exciton-polaritons in monolayer black phosphorus," *Nature communications*, vol. 12, 2021, Art. no. 5628.
- [9] K. Ludwiczak, A. K. Dąbrowska, J. Binder, M. Tokarczyk, J. Iwański, B. Kurowska, J. Turczyński, G. Kowalski, R. Bożek, R. Stępniewski, W. Pacuski, and A. Wyszomolek, "Heteroepitaxial growth of high optical quality, wafer-scale van der Waals heterostructures," *ACS Applied materials and interfaces*, vol. 13, no. 40, pp. 47904-47911, 2021.
- [10] B. Bucher, P. Steiner, and P. Wachter, "Excitonic insulator phase in TmSe_{0.45}Te_{0.55}," *Physical Review Letters*, vol. 67, 1991, Art. no. 2717.
- [11] P. Wachter, "Exciton condensation in an intermediate valence compound: TmSe_{0.45}Te_{0.55}," *Solid State Communications*, vol. 118, pp. 645-650, 2001.
- [12] D. Ihle, M. Pfafferoth, E. Burovski, F. X. Bronold, and H. Fehske, "Bound state formation and nature of the excitonic insulator phase in the extended Falicov-Kimball model," *Physical Review B*, vol. 78, 2008, Art. no. 193103.
- [13] N. V. Phan, H. Fehske, and K. W. Becker, "Excitonic resonances in the 2D extended Falicov-Kimball model," *Europhysics Letter*, vol. 95, 2011, Art. no. 17006.
- [14] B. Zenker, D. Ihle, F. X. Bronold, and H. Fehske, "On the existence of the excitonic insulator phase in the extended Falicov-Kimball model: a SO(2)invariant slave-boson approach," *Physical Review B*, vol. 81, 2010, Art. no. 115122.
- [15] R. Ramirez, L. M. Falicov, and J. C. Kimball, "Metal-insulator transitions: A simple theoretical model," *Physical Review B*, vol. 2, 1970, Art. no. 3383.
- [16] T. H. H. Do, T. H. Nguyen, and Q. A. Ho, "Temperature effect on the excitonic condensation state in the extended Falicov – Kimball model including electron-phonon interaction," (in Vietnamese), *Journal minitary science and technology*, special issue, pp. 204-209, April 2018.
- [17] H. H. T. Do and V. N. Phan, "Spectral properties in the extended Falicov-Kimball model involving the electron-phonon interaction: Excitonic insulator state formation," (in Vietnamese), *DTU Journal of Science and Technology*, vol. 6, no. 31, pp. 89-94, 2018.
- [18] H. H. T. Do and V. N. Phan, "Phase diagram of excitonic condensation state in the extended Falicov-Kimball model involving the electron-phonon interaction," (in Vietnamese), *DTU Journal of Science and Technology*, vol. 6, no. 31, pp. 95-100, 2018.

-
- [19] T. H. H. Do, D. H. Bui, and V. N. Phan, "Phonon effects in the excitonic condensation induced in the extended Falicov-Kimball model," *Europhysics Letters*, vol. 119, no. 4, 2017, Art. no. 47003.
- [20] T. H. H. Do, H. N. Nguyen, and V. N. Phan, "Thermal Fluctuations in the Phase Structure of the Excitonic Insulator Charge Density Wave State in the Extended Falicov-Kimball Model," *Journal of Electronic Materials*, vol. 48, pp. 2677-2684, 2019.
- [21] P. Wachter, "Exciton Condensation and Superfluidity in $\text{TmSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$," *Advances in Materials Physics and Chemistry*, vol. 8, no. 3, pp. 120-142, 2018.
- [22] T. H. H. Do and T. H. Nguyen, "Influence of the electronic mobility on the excitonic insulator state in semimetal materials," (in Vietnamese), *Journal minitary science and technology*, special issue, pp. 57-62, April 2018.