

855 M.4-91

VIỆN KHOA HỌC VIỆT NAM

BAO CAO KHOA HỌC

Đề tài : 48E.01.01

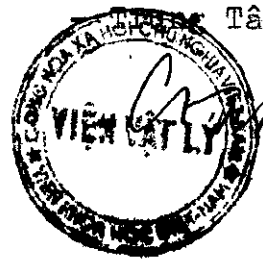
Tên đề tài : Cấu trúc điện tử của chất rắn

Cơ quan thực hiện đề tài

- Viện Vật Lý

Tâm Vật Lý Lý thuyết

PHÓ VIỆN TRƯỞNG



*Handwritten signature*

Chủ trì đề tài

- Đỗ Xuân Thành

- Nguyễn Ái Việt

Cộng tác viên

- Phòng TBKH Viện Vật Lý

- TT Vật Lý Lý Thuyết

TRUNG TÂM THÔNG TIN VÀ LIỆP  
KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ QUỐC GIA

855 M.4-91

CÔNG TRÌNH NGHIÊN CỨU

Chủ tịch Hội đồng nghiệm thu

Cơ quan quản lý đề tài

*Handwritten signature of the Chairman of the Review Board*

PHÓ VỤ TRƯỞNG  
KẾ HOẠCH TỔNG HỢP



*Handwritten signature of the Deputy Director of the Planning Office*

## NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC ĐIỆN TỬ

### CUA CHẤT RẮN

Phần lớn các thiết bị, linh kiện của kỹ thuật hiện đại đều hoạt động trên cơ sở những nguyên lý là các hiệu ứng vật lý trong các môi trường vật chất, nhất là các chất rắn. Không có những thành tựu khoa học tuyệt vời về các quá trình vật lý trong chất rắn thì không thể có kỹ thuật điện tử và tự động hoá như ngày nay. Ở nước ta nghiên cứu cơ bản về các tính chất vật lý của các vật liệu về các quá trình vật lý vi mô trong chất rắn, là hết sức cần thiết nhằm xây dựng tiềm lực khoa học của đất nước để thực hiện một cách có hiệu quả việc chuyển giao công nghệ trong một số lĩnh vực kỹ thuật hiện đại vào nước ta, đồng thời tiến hành cải tiến hoặc sáng tạo mới những công nghệ, kỹ thuật hiện đại thích hợp với hoàn cảnh nước ta.

Nhiều tính chất vật lý của các chất rắn là cơ sở khoa học cho việc sử dụng các vật liệu đó trong kỹ thuật hiện đại, nhất là các tính chất điện và tính chất quang, lại do cấu trúc điện tử của các chất này quyết định. Do đó khoa học về cấu trúc điện tử của các chất rắn là một nội dung nghiên cứu cơ bản cố định hướng rất có triển vọng trong chương trình vật liệu mới. Trung tâm Vật lý lý thuyết đã đạt nhiều kết quả xuất sắc trong việc nghiên cứu lý thuyết cấu trúc điện tử của các chất rắn từ nhiều năm trước và được phân công chủ trì phần nghiên cứu lý thuyết. Tiếp tục hướng nghiên cứu có tính chất truyền thống về các chuẩn hạt trong chất rắn, đã hoàn thành một loạt đề tài nghiên cứu về các quá trình tương tác của các exciton và các polariton, về vai trò của các chuẩn hạt này trong các hiệu ứng quang học mới được phát minh trong những năm gần đây như hiện tượng lưỡng ổn định (bistability) là nguyên lý khoa học của các linh kiện điều khiển cực nhanh. Kết quả thu được đã công bố trong hơn 30 bài báo.

Song song với các đề tài lý thuyết, chương trình vật liệu và viện vật lý đã đầu tư xây dựng một hệ đo quang học để nghiên cứu cấu trúc điện tử của vật liệu ở trình độ quốc tế. Giai đoạn đầu của việc xây dựng hệ đo bắt đầu được sử dụng để tiến hành nghiên cứu vật lý. những kết quả đầu tiên sẽ được báo cáo tại Hội nghị quốc tế về khoa học vật liệu tổ chức tại Hà nội vào

tháng 10 năm nay.

Trong những năm tới hệ đo đó sẽ được tiếp tục hoàn chỉnh và bổ sung với thiết bị hiện đại chúng tôi hy vọng rằng sẽ có sự tham gia của các nhà lý thuyết vào các đề tài nghiên cứu thực nghiệm.

Đề tài 48E. 01. 01a.

Lý thuyết cấu trúc điện tử của chất rắn.

Trong thời gian thực hiện đề tài 1987-1990 đã thu được những kết quả nghiên cứu và được công bố trong các bài báo sau :

1. ChanDi Khamsasy, Nguyễn Văn Hiệu, Nguyễn Ái Việt.

Polariton 3 nhánh trong bán dẫn lập phương vùng cấm thẳng.

Phys Stat. Sol (b) 144, 645 (1987).

Nghiên cứu sự chuyển hoá giữa photon và các exciton nặng, nhẹ trong bán dẫn lập phương vùng cấm thẳng với vùng hóa trị cao nhất có sung biến bậc 4 ở tâm vùng Brillouin. Đã tính yếu tố ma trận chuyển mức trong gần đúng bậc 2 theo nhiễu loạn. Dẫn ra phương trình đại số xác định định luật tán sắc của polariton 3 nhánh. Thiết lập cấu trúc spin của hàm sóng các exciton nói trên.

2. Nguyễn Hồng Quang, Nguyễn Toàn Thắng, Nguyễn Ái Việt.

Tán xạ Raman chuyển vùng của ánh sáng phân cực trong bán dẫn lập phương có vùng hoá trị suy biến.

Czech. J. Phys. B37, 809 (1987).

Tính tích diện của quá trình tán xạ Raman với ánh sáng phân cực trong bán dẫn lập phương có đỉnh vùng hoá trị suy biến bậc 4 khi có kể đến hiệu ứng exciton.

3. Nguyễn Hồng Quang, Nguyễn Toàn Thắng, Nguyễn Ái Việt.

Sự ra của exciton Wannier - Mott khi có tương tác với phonon âm trong bán dẫn với vùng hoá trị suy biến !

Preprint ICTP, IC/87/77. Trieste, Italy 1987.

Tính độ rã của exciton nặng và nhẹ khi có tương tác với phonon âm trong bán dẫn lập phương với vùng hoá trị suy biến. Kết quả tính số cho bán dẫn GaAs chỉ ra rằng xấp xuất rã của exciton nhẹ lớn hơn nhiều so với exciton nặng.

4. Nguyễn Quê Hương, Nguyễn Toàn Thắng, Nguyễn Ái Việt.

Tính chất tinh tế của phổ năng lượng exciton trong bán dẫn lập phương có vùng cấm thẳng và vùng hoá trị suy biến.

Preprint ICTP, IC/87/79. Trieste Italy 1987.

Nghiên cứu cấu trúc tinh tế của exciton trong bán dẫn lập

phương vùng cấm thẳng. Dẫn ra biểu thức tường minh của các mức exciton 1S, 2S, 2P khi có kể đến sự phụ thuộc hướng của khối lượng hiệu dụng của các lỗ trống. so sánh với các số liệu từ các lý thuyết khác và thực nghiệm ch bán dẫn ZnSe.

5. Nguyễn Toàn Thắng, Nguyễn Ái Việt.

Lý thuyết hấp thụ hai phonon bởi exciton trong bán dẫn lập phương có vùng hoá trị suy biến.

Preprint ICTP, IC/87/80. Trieste Italy 1987.

Tính hệ số hấp thụ hai photon phân cực trong bán dẫn thẳng có vùng hoá trị suy biến. Exciton Wannier-Mott đã được tính đến trong cả ở trạng thái trung gian và trạng thái cuối. Tính số cho bán dẫn ZnSe và thực hiện so sánh kết quả với thực nghiệm.

6. Nguyễn Quê Hương, Nguyễn Toàn Thắng, Nguyễn Ái Việt.

Tương tác trao đổi và hàm sóng của các exciton trong bán dẫn thẳng lập phương.

JINR Rapid. Commun., No 5(31), 31 (1988)

Nghiên cứu tương tác trao đổi và các hàm sóng của các exciton trong trạng thái cơ bản nS trong bán dẫn lập phương có vùng hoá trị suy biến.

7. Nguyễn Quê Hương, Nguyễn Toàn Thắng, Nguyễn Ái Việt.

Tán xạ Raman điện tử cộng hưởng trên các mức donor trong bán dẫn lập phương.

Czech. J. Phys. (1990).

Nghiên cứu tán xạ Raman điện tử cộng hưởng trên các mức donor trong bán dẫn lập phương. Xây dựng lý thuyết polaron của quá trình tán xạ. Dẫn ra biểu thức tường minh của tiết diện tán xạ. Thực hiện việc tính số và so sánh với các số liệu thực nghiệm cho bán dẫn GaAs.

8. Nguyễn Quê Hương, Nguyễn Toàn Thắng, Nguyễn Ái Việt.

Tương tác trao đổi của exciton trong bán dẫn lập phương có vùng hoá trị suy biến.

Phys. Stat. Sol (b) (1990).

Dẫn ra biểu thức tổng quát tường minh của phổ năng lượng và hàm sóng của các exciton trong các bán dẫn thẳng lập phương có vùng hoá trị suy biến khi có kể đến tương tác trao đổi của các exciton. Trong trường hợp riêng cho các kết quả đã biết

9. Nguyễn Hồng Quang, Nguyễn Toàn Thắng, Nguyễn Ái Việt.

Tán xạ Brillouin cộng hưởng trong bán dẫn lập phương có vùng hoá trị suy biến

Czech. J. Phys. B. (1990)

Xây dựng lý thuyết polariton của quá trình tán xạ Brillouin cộng hưởng trong bán dẫn lập phương có vùng hoá trị suy biến. Dẫn ra biểu thức tường minh của tiết diện tán xạ. Thực hiện tính toán số và so sánh với thực nghiệm.

10. Nguyễn Văn Hiệu, Nguyễn Ái Việt.

Exciton polariton 3 nhánh trong bán dẫn lập phương có vùng cấm thẳng và các quá trình tán xạ Raman của chúng.

DAN USSR, 305, No 3, 608 (1989).

Dẫn ra biểu thức tường minh của vector trạng thái của exciton polariton 3 nhánh trong bán dẫn thẳng lập phương có vùng hoá trị suy biến cấp 4. Sử dụng biểu thức nói trên vào nghiên cứu các quá trình tán xạ Raman cộng hưởng của ánh sáng phân cực trong các chất bán dẫn với tính chất đối xứng đã cho.

11. Nguyễn Văn Hiệu, Nguyễn Hồng Quang, Nguyễn Ái Việt.

Lý thuyết polariton của tán xạ Raman cộng hưởng của ánh sáng phân cực trên phonon trong bán dẫn lập phương có vùng cấm thẳng.

DAN USSR, 306, No 3, 579 (1989).

Nghiên cứu tán xạ Raman cộng hưởng của ánh sáng phân cực trên phonon trong bán dẫn lập phương có vùng hoá trị suy biến khi có kể đến cấu trúc nội tại và tính chất đối xứng của các exciton polariton. Tiên đoán các hiệu ứng phân cực của quá trình.

12. Nguyễn Văn Hiệu, Nguyễn Ái Việt.

Lý thuyết polariton của tán xạ Raman cộng hưởng trên các mức donor trong bán dẫn lập phương có vùng cấm thẳng.

JINR Rapid Commun. No 2 (28), 43 (1988).

Nghiên cứu tán xạ Raman cộng hưởng của ánh sáng phân cực trên các mức donor trong bán dẫn lập phương có vùng cấm thẳng. Tiên đoán các hiệu ứng phân cực gần bởi các tính chất đối xứng của các exciton nặng và nhẹ.

13. Nguyễn Văn Hiệu, Nguyễn Ái Việt.

Lý thuyết tán xạ Raman điện tử cộng hưởng trên các mức donor trong bán dẫn lập phương.

Phys. Mnogochar, System. (1981)

Xây dựng lý thuyết tán xạ cộng hưởng của ánh sáng phân cực trên các mức donor trung hoà trong các chất bán dẫn có vùng cấm thẳng khi có kể đến tính chất đối xứng của các exciton. Tiên đoán các hiệu ứng phân cực.

14. Nguyễn Ái Việt.

Phương pháp lý thuyết phản ứng chung tương đối tính trong Vật lý các môi trường đông đặc.

Elem. Particle Atomic Nucle 20, No 5, 1100 (1989)

Phát triển phương pháp lý thuyết phản ứng chung tương đối tính trong lý thuyết hạt cơ bản sang hệ các chuẩn hạt trong chất rắn khi có kể đến các tính chất đối xứng của chúng. để ví dụ, đã xem xét một số quá trình vật lý : tán xạ của ánh sáng phân cực tán xạ Raman điện tử cộng hưởng, exciton và excitonic polariton trong bán dẫn thẳng lập phương có vùng hoá trị suy biến cấp 4, sự kết cặp của điện tử trong chất siêu dẫn đẳng hướng với tương tác electron - electron hiệu dụng phụ thuộc spin.

15. Nguyễn Bá An.

"Các trạng thái dừng, không cân bằng của các exciton trong các tinh thể phân tử kích thích bằng laser"

Phys. Stat. Sol. (b) 150, 845 (1988).

Nghiên cứu các trạng thái dừng, không cân bằng của các exciton trong các tinh thể phân tử ba chiều không dựa vào hình thức luận boson thông thường mà sử dụng các hệ thức giao hoán tử tam tuyến chính xác của các toán tử exciton. Các đặc tính không cân bằng, phi boson và phi tuyến quang học của các hệ nhiều exciton dưới tác dụng của trường laser ngoài cổ điển được xem xét trên cùng một cơ sở. chỉ ra rằng năng lượng riêng và bề rộng phân rã của các polariton không hề phụ thuộc vào mức độ kích thích. Xác định được điều kiện làm xuất hiện hai loại lưỡng ổn định : loại mật độ-ánh sáng và loại ánh sáng-ánh sáng

16. Nguyễn Bá An

"Phương pháp biến đổi Bogolubov từng bước để chéo hóa một dạng Hamiltonian hiệu dụng không hermitic"

J. Physics C: Solid State Phys. 21, L1209 (1988)

Đề xuất một phương pháp để chéo hóa một dạng Hamilton không hermitic. Có thể áp dụng để vẽ hệ thức tán sắc của polariton không lồ.

17. Nguyễn Bá An, Nguyễn Trung Dân

"Một cơ chế lưỡng ổn định quang học mới"

Phys. Lett. A 136, 71 (1989)

Đề xuất một cơ chế tạo ra lưỡng ổn định quang học trong bán dẫn khối gần cộng hưởng hai photon-biexciton.

18. Nguyễn Bá An, Nguyễn Trung Dân

"Sự phụ thuộc của các đặc trưng quang học vào cường độ của ánh sáng trong bán dẫn"

J. Phys. France 50, 1009 (1989)

Các đặc trưng quang học phi tuyến của chất bán dẫn được nghiên cứu gần cộng hưởng hai photon-biexciton. Chỉ ra rằng lưỡng ổn định quang học có thể xảy ra dưới cộng hưởng nói trên với cường độ trường kích rất thấp.

19. Nguyễn Bá An, Nguyễn Trung Dân

"Lưỡng ổn định quang học do sự tạo thành các biexciton ảo trong bán dẫn"

Czech. J. Phys. B39, 774 (1989)

Nghiên cứu lý thuyết lưỡng ổn định quang học trong hệ photon-biexciton đồng bộ. Chỉ ra rằng lưỡng ổn định do các chuyển mức hai photon - biexciton có thể xảy ra nếu hệ được bơm bởi một trường bơm. Các điều kiện làm xuất hiện lưỡng ổn định được xác định.

20. Nguyễn Bá An

" Các kỳ dị của tán sắc polariton trong tinh thể phân tử kích thích quang"

J. Phys. : Condens. Matter 1, 9834 (1989)

Các kỹ thuật làm green và biến đổi unitar được vận dụng để nghiên cứu sự tạo thành polariton trong tinh thể phân tử đặt dưới tác dụng của một trường ánh sáng đơn sắc mạnh. Sử dụng các hệ thức giao hoán tam tuyến chính xác của các toán tử exciton Frenkel chỉ ra sự phụ thuộc của năng lượng polariton vào nồng độ của các exciton. Sau đó xây dựng một Hamiltonian hiệu dụng cho phép nhận được sự phụ thuộc vào cường độ ánh sáng kích của nồng độ exciton. Do tính lưỡng hoặc đa ổn định, các đường cong tán sắc của polariton phụ thuộc vào cường độ ánh sáng và có thể biểu hiện những kỳ dị khác nhau như sự tách rẽ đôi mỗi nhánh polariton, sự xuất hiện các sóng bổ xung ngay cả trong trường hợp bỏ qua tán sắc không gian của exciton.

21. Nguyễn Bá An, Đỗ Nam, Lê Quý Thông



"Tái hợp phát quang của exciton trong bán dẫn loại n"

Tạp chí Khoa học, Đại học THHN 2,20 (1989)

Tái hợp phát quang của exciton trong bán dẫn loại n được nghiên cứu có chú ý đến ảnh hưởng của cả điện tử donor. Các tính toán số đã được thực hiện cho CdS.

22. Nguyễn Bá An, Nguyễn Trung Dân

"Phản xạ lưỡng ổn định do các chuyển mức hai photon-biexciton trong các bán dẫn khối"

Czech. J. Phys. B40, 90 (1990)

Xét một cơ chế mới của lưỡng ổn định quang học. Cho thấy lưỡng ổn định quang học. Cho thấy lưỡng ổn định có thể xảy ra với cường độ bơm rất thấp nếu tần số ánh sáng bơm được chỉnh sao cho nhỏ hơn cộng hưởng hai photon sinh biexciton.

23. Nguyễn Bá An

"Sự phụ thuộc vào cường độ của hấp thụ và chiết suất trong các bán dẫn kích thích cao gần bờ vùng"

J.Phys. France 51,1 (1990)

Sự phụ thuộc của  $\epsilon$  và  $n$  vào cường độ ánh sáng được nghiên cứu trong vùng phổ gần bờ vùng. Tính phi boson có thể đóng vai trò như một cơ chế của phi tuyến dẫn đến các dạng hình lưỡng ổn định của  $\epsilon$  và  $n$ .

24. Nguyễn Bá An, Hoàng Ngọc Cẩm

"Một cách tiếp cận đối với hệ nhiều exciton"

J.Phys.: Condens. Matter 2, 4127 (1990)

Một cách tiếp cận khá trực tiếp để nghiên cứu các hệ exciton nồng độ cao được phác thảo để chú ý một cách triệt để tính phi boson của các exciton. Cho thấy hệ nhiều exciton luôn là không lý tưởng và do đó chỉ có thể mô tả được bằng năng lượng toàn phần và tổng số exciton. Năng lượng một exciton và hàm phân bố có thể hiểu được một cách đơn giản trong phép gần đúng trường trung bình. Cả hai phụ thuộc vào nồng độ exciton. Cách tiếp cận có thể áp dụng cho cả exciton Frenkel và exciton Wannier-Mott trong các vật lý liệu khối hoặc có thứ nguyên thấp, có hoặc không có tác dụng của trường ngoài.

25. Nguyễn Bá An, Hoàng Ngọc Cẩm, Nguyễn Trung Dân

"Thế năng tương tác exciton-exciton phụ thuộc spin trong các bán dẫn 2 và 3 chiều"

ICTP Preprint, IC/90/224 (1990)

Dẫn ra một cách gần đúng các biểu thức giải tích của thế năng tương tác exciton - exciton trong bán dẫn 2 và 3 chiều. Các thế năng phụ thuộc vào hiệu xung lượng của các exciton, xung lượng truyền, tỷ số khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống và đối xứng spin của trạng thái hai exciton. Các tính toán bằng số được thực hiện trong hệ trục 3 chiều.

26. Nguyễn Bá An, Hoàng Xuân Nguyên.

"Về tính lưỡng ổn định trong tán sắc của polariton trong các tinh thể kích thích quang"

Phys. Lett. A144, 45(1990)

Xử dụng phép gần đúng Hartree-Fock và Hamiltonian của Hanamura chỉ ra rằng tán sắc polariton có thể có tính lưỡng ổn định.

27. Nguyễn Bá An, Hoàng Xuân Nguyên

"Phi tuyến quang học do tính phi boson của các exciton W Wannier-Mott trong các bán dẫn kích thước cao"

Tạp chí Vật lý XV2, ... (1990)

Chỉ ra rằng tính phi boson của các exciton Wannier-Mott dẫn đến sự dịch về phía xanh của mức năng lượng và có thể gây ra lưỡng ổn định. Sự phụ thuộc của hàm điện môi phức vào nồng độ exciton và cường độ trường laser bơm được khảo sát bằng số cho GaS.

28. Nguyễn Bá An, Lê thị Cát Tường

"Các vòng trễ khả dĩ của lưỡng ổn định quang học không có buồng cộng hưởng"

ICTP Preprint, IC/90/75 (1990)

Một cách định tính chỉ ra rằng các vòng trễ của hiện tượng lưỡng ổn định quang học riêng có thể có rất nhiều dạng kể cả dạng con bướm hay cái nơ ba cánh.

29. Nguyễn Bá An, Hoàng Ngọc Cầm

"Tương tác giữa các exciton trong bán dẫn kích thích 3- và 2 chiều"

Czech. J. Phys. B40 (1990), đã nhận đăng

Một phép gần đúng được đưa ra để tính giải tích tương tác giữa các exciton cho thấy rõ sự phụ thuộc vào xung lượng và khối lượng