

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM
VIỆN VẬT LÝ

VÕ THỊ HOA

**LÝ THUYẾT EXCITON VÀ BIEXCITON LOẠI HAI TRONG
HỆ HAI CHẤM LƯỢNG TỬ VÀ LỚP KÉP GRAPHENE**

Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết và Vật lý toán
Mã số chuyên ngành: 62 44 01 03

Người hướng dẫn khoa học:

- 1. GS. TSKH. Nguyễn Ái Việt**
- 2. TS. Ngô Văn Thanh**

HÀ NỘI – 2014

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan đây là công trình nghiên cứu của riêng tôi. Các số liệu, kết quả mới mà tôi công bố trong luận án là trung thực và chưa được ai công bố trong bất kỳ công trình nào khác.

Hà Nội, ngày.....tháng.....năm 2014

Tác giả

Võ Thị Hoa

LỜI CẢM ƠN

Để được đi học ở Viện Vật lý – Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam, trước hết tôi xin chân thành cảm ơn sự giúp đỡ của TS. Lê Duy Phát, nguyên hiệu trưởng trường Đại học Quảng Nam, TS. Huỳnh Trọng Dương, hiệu trưởng trường Đại học Quảng Nam cùng tập thể cán bộ giảng viên Khoa Lý - Hóa - Sinh.

Trong quá trình học tập và làm việc tại Viện Vật lý, dưới sự hướng dẫn của GS. TSKH. Nguyễn Ái Việt và TS. Ngô Văn Thanh, tôi đã học hỏi được rất nhiều kiến thức Vật lý, Toán học cũng như ứng dụng máy tính để mô phỏng các bài toán. Để hoàn thành được Luận án Tiến sĩ này và để có thể trở thành một người có khả năng độc lập nghiên cứu Khoa học, tôi xin gửi đến hai người thầy hướng dẫn trực tiếp của tôi lời cảm ơn sâu sắc nhất với tất cả tình cảm yêu quý cũng như lòng kính trọng của mình.

Tôi cũng xin gửi lời cảm ơn sâu sắc đến các thành viên trong nhóm Vật lý lý thuyết và vật lý toán đã giúp đỡ tôi rất nhiều trong suốt quá trình thực hiện luận án này.

Tôi xin chân thành cảm ơn Viện Vật lý đã tạo điều kiện thuận lợi cho tôi học tập và nghiên cứu tại Viện, phòng sau đại học đã hỗ trợ tôi hoàn thành các thủ tục bảo vệ luận án.

Cuối cùng, tôi xin được dành tất cả những thành quả trong học tập của mình dâng tặng những người thân yêu trong gia đình, những người luôn ở bên cạnh động viên và giúp đỡ tôi vượt qua mọi khó khăn.

MỤC LỤC

LỜI CAM ĐOAN	i
LỜI CẢM ƠN.....	ii
MỤC LỤC	iii
DANH MỤC CÁC HÌNH	vii
DANH MỤC CÁC BẢNG.....	xi
MỞ ĐẦU.....	1
Chương 1. TỔNG QUAN VỀ HỆ THẤP CHIỀU	5
1.1. KHÁI NIỆM HỆ THẤP CHIỀU	5
1.2. ĐIỆN TỬ TRONG HỆ THẤP CHIỀU	6
1.2.1. Hạt chuyển động trong hố thế vuông góc.....	6
1.2.2. Điện tử trong hệ hai chiều.....	7
1.2.3. Điện tử trong hệ một chiều.....	7
1.2.4. Điện tử trong hệ không chiều.....	7
1.3. ĐẠI CƯƠNG VỀ EXCITON VÀ BIEXCITON.....	10
1.3.1. Exciton – Exciton loại 1 – Exciton loại 2	10
1.3.2. Biexciton – Biexciton loại 1 – Biexciton loại 2	14
1.4. EXCITON LOẠI 1 TRONG CÁC HỆ THẤP CHIỀU	15
1.4.1. Phương trình Wannier.....	15
1.4.2. Trường hợp hệ hai chiều và ba chiều.....	19
1.4.3. Trường hợp hệ một chiều.....	20
1.4.4. Trường hợp hệ không chiều	21

1.5. BIEXCITON LOẠI 1 TRONG CÁC HỆ THẤP CHIỀU.....	24
1.5.1. Biexciton trong giếng lượng tử	24
1.5.2. Biexciton trong ống nanô.....	27
1.5.3. Biexciton trong chấm lượng tử.....	30
1.6. KẾT LUẬN CHƯƠNG 1	35
Chương 2. EXCITON VÀ BIEXCITON LOẠI 2 TRONG HỆ HAI	
CHẤM LƯỢNG TỬ'	37
2.1. MÁY TÍNH LƯỢNG TỬ'.....	37
2.1.1. Mô hình máy tính lượng tử spin.....	38
2.1.2. Mô hình máy tính lượng tử quang.....	40
2.1.3. Biexciton trong bán dẫn khối	41
2.2. EXCITON LOẠI 2 TRONG HAI CHẤM LƯỢNG TỬ'.....	46
2.2.1. Mô hình exciton loại 2 trong hai chấm lượng tử.....	46
2.2.2. Năng lượng liên kết của exciton loại 2 trong hai chấm lượng tử.....	51
2.3. BIEXCITON LOẠI 2 TRONG HAI CHẤM LƯỢNG TỬ CÙNG KÍCH THƯỚC	57
2.3.1. Mô hình biexciton loại 2 trong hai chấm lượng tử cùng kích thước.....	57
2.3.2. Năng lượng của biexciton loại 2 trong hai chấm lượng tử cùng kích thước khi chưa tính đến thế tương tác.....	59
2.3.3. Năng lượng liên kết của biexciton loại 2 trong hai chấm lượng tử cùng kích thước	60
2.4. BIEXCITON LOẠI 2 TRONG HAI CHẤM LƯỢNG TỬ CÓ KÍCH THƯỚC KHÁC NHAU	66
2.4.1. Mô hình biexciton loại 2 trong hai chấm lượng tử có kích thước khác nhau.....	66

2.4.2. Năng lượng của biexciton loại 2 trong hai chấm lượng tử khác kích thước khi chưa tính đến thể tương tác.....	68
2.4.3. Thông số tương tác Förster (biểu thị qua năng lượng liên kết biexciton loại 2)	69
2.5. KẾT LUẬN CHƯƠNG 2	73
Chương 3. EXCITON VÀ BIEXCITON LOẠI 2 TRONG HỆ CÁC LỚP GRAPHENE.....	75
3.1. GRAPHENE	75
3.2. EXCITON LOẠI 2 TRONG LỚP KÉP GRAPHENE	78
3.2.1. Cấu trúc năng lượng trong lớp kép graphene.....	78
3.2.2. Exciton loại 2 trong lớp kép graphene.....	81
3.3. BIEXCITON TỪ TRONG HỆ LỚP TAM GRAPHENE.....	84
3.3.1. Mô hình biexciton trong hệ lớp tam graphene.....	85
3.3.2. Thế của hệ exciton từ trong hệ lớp tam graphene	85
3.3.3. Gần đúng thế Morse.....	88
3.3.4. Sự phụ thuộc của các mức năng lượng vào khoảng cách giữa các lớp graphene và từ trường.....	90
3.4. KẾT LUẬN CHƯƠNG 3	95
KẾT LUẬN.....	97
Danh sách các công bố khoa học:	99
TÀI LIỆU THAM KHẢO.....	100

DANH MỤC CÁC CHỮ VIẾT TẮT

0D (Zero dimension)	: Không chiều
1D (One dimension)	: Một chiều
2D (Two dimensions)	: Hai chiều.
3D (Three dimensions)	: 3D
CB (Conduction band)	: Vùng dẫn
GS (Ground state)	: Trạng thái cơ bản
Q1D(Quasi one dimension)	: Giả một chiều
Q2D (Quasi two dimensions)	: Giả hai chiều
QD (Quantum dots)	: Chấm lượng tử
QW (Quantum well))	: Giếng lượng tử
QWs (Quantum wires)	: Dây lượng tử
VB (Valence band)	: Vùng hoá trị

DANH MỤC CÁC HÌNH

Hình 1.1. Sơ đồ của sự hình thành không cộng hưởng exciton trong giếng lượng tử. $h\nu$ là năng lượng của ánh sáng kích thích, L chỉ độ rộng của giếng, PL là năng lượng phát quang, ΔE_c và ΔE_v lần lượt là độ lệch vùng dẫn và vùng hoá trị [86].	11
Hình 1.2. Exciton xiên theo không gian \vec{r} ; a) Exciton mặt tiếp giáp; b) exciton trong QW, c) exciton trong chấm lượng tử [2].	13
Hình 1.3. Exciton xiên theo không gian xung lượng k [2].	13
Hình 1.4. Sơ đồ 4 mức minh họa sự hình thành giả hạt biexciton [116,117].	14
Hình 1.5. Mô hình biexciton hai chiều giam giữ trong giếng lượng tử có bề rộng hẹp so với kích thước của biexciton [88].	24
Hình 1.6. Cấu trúc hình học của trạng thái biexciton trên bề mặt của hình trụ [83].	28
Hình 1.7. Năng lượng liên kết của biexciton trong ống nanô [83].	29
Hình 1.8. Năng lượng liên kết của biexciton khi tỉ số khối lượng $m_e/m_h \approx 0,1$ (đường 1); 0,2 (đường 2); 1 (đường 3). Đường đứt nét cho thấy kết quả của gần đúng bậc 3 theo lý thuyết nhiễu loạn [8].	33
Hình 1.9. Năng lượng liên kết của biexciton phụ thuộc vào bán kính chấm khi $\epsilon = \epsilon_1/\epsilon_2 \approx 1$ (đường liền nét); $\epsilon \approx 10$ (đường đứt nét) [8].	34
Hình 2.1. Nguyên lý hoạt động của máy tính lượng tử [119].	37
Hình 2.2. Thế tương tác exciton-exciton. Đường không liền nét và đường chấm lần lượt là kết quả của Heitler và London [40] và Brinkman [15].	43
Hình 2.3. Năng lượng liên kết của biexciton là hàm của $\sigma = m_e/m_h$ (đường liền nét). Đường không liền nét và đường chấm lần lượt là kết quả của Akimoto và Hanamura [6] và Brinkman [15].	44
Hình 2.4. Các mức năng lượng của biexciton ($n = 0, n = 1$), và so sánh với số liệu thu được từ thực nghiệm.	45
Hình 2.5. Sơ đồ dải năng lượng của chấm lượng tử.	46
Hình 2.6. Mô hình cặp điện tử-lỗ trống trong hai chấm lượng tử (exciton loại 2).	47

Hình 2.7. Năng lượng liên kết của exciton loại hai trong hai chấm lượng tử phụ thuộc vào khoảng cách d ($\ell = d/a$) giữa hai chấm.	53
Hình 2.8. Năng lượng liên kết của exciton loại hai phụ thuộc vào bán kính hiệu dụng của chuyển động tương đối a ($\gamma = a/a_0$).....	54
Hình 2.9. Năng lượng liên kết của exciton loại 2 phụ thuộc vào hằng số điện môi ϵ	54
Hình 2.10. Năng lượng liên kết của exciton loại 2 phụ thuộc vào khoảng cách giữa hai chấm d và hằng số điện môi ϵ	55
Hình 2.11. Năng lượng liên kết của exciton loại hai phụ thuộc tỉ lệ nghịch với kích thước chấm theo Tomasulo và Ramakrishna [95].	56
Hình 2.12. Năng lượng của exciton tiếp giáp phụ thuộc vào d [66].....	56
Hình 2.13. Mô hình hai exciton nằm trong hai chấm lượng tử.....	57
Hình 2.14. Đường biểu diễn của thế Morse.....	61
Hình 2.15. Năng lượng liên kết của hai exciton nằm trong hai chấm với thế tương tác Morse phụ thuộc vào ℓ	63
Hình 2.16. Năng lượng liên kết của hai exciton nằm trong hai chấm với thế tương tác Morse phụ thuộc vào f	63
Hình 2.17. Năng lượng liên kết của hai exciton nằm trong hai chấm với thế tương tác Morse theo f và ℓ	64
Hình 2.18. Năng lượng liên kết của hai exciton nằm trong hai chấm khi tính gần đúng được biểu diễn theo ℓ (giả sử $f = 1$).	65
Hình 2.19. Mô hình biexciton trong hai chấm lượng tử khác kích thước.	67
Hình 2.20. Sự phụ thuộc của tỉ số tương tác Förster như là hàm của tỉ số kích thước chấm σ (với giả định $f = 1$).....	71
Hình 3.1. Graphene và các dạng hình thù bền của cacbon được hình thành từ graphene [118].	75
Hình 3.2. Lớp đơn graphene và phổ năng lượng tán sắc đối với lớp đơn graphene [121].	76

Hình 3.3. Lớp kép graphene và các dải năng lượng liên kết π của lớp kép graphene [121].	76
Hình 3.4. Lớp tam graphene và các dải tán sắc năng lượng của lớp tam graphene [121]... 76	76
Hình 3.5. Sự hình thành exciton trong lớp kép graphene [84].....	77
Hình 3.6. Cấu trúc mạng của lớp kép graphene (cấu trúc xếp chặt Bernal) và năng lượng dịch chuyển tương ứng t . γ là năng lượng dịch chuyển giữa A_1 và B_2	79
Hình 3.7. Mạng không gian thực và vùng Brillouin của graphene. a) Mạng tổ ong của graphene được tạo thành do sự xâm nhập của 2 mạng tam giác A và B. b) Vùng Brillouin của graphene với hai điểm Dirac K và K'	79
Hình 3.8. Phổ năng lượng đối với lớp kép graphene với $t = 2,9eV$ và $\gamma = 0,39eV$. Cấu trúc dải của lớp kép graphene gần điểm Dirac đối với $V = 0,39eV$ (đường liên tục) và $V = 0$ (đường chấm mờ).	81
Hình 3.9. Mô hình chuyển tiếp của exciton.....	82
Hình 3.10. Biexciton từ xiên trên các lớp graphene.....	85
Hình 3.11. Thế năng tương tác $U(r)$	86
Hình 3.12. Hình dáng của thế ban đầu và thế gần đúng dao động điều hoà.....	86
Hình 3.13. Năm mức năng lượng đầu tiên của phép gần đúng điều hoà.....	88
Hình 3.14. Hình dáng của thế ban đầu và thế Morse.	89
Hình 3.15. Năm mức năng lượng đầu tiên của gần đúng Morse.	90
Hình 3.16. Sự phụ thuộc của mức năng lượng E_0 vào khoảng cách D giữa các lớp, với các giá trị từ trường $B(30; 20; 10; 5; 2; 1; 0, 5; 0, 2)$	91
Hình 3.17. Sự phụ thuộc của mức năng lượng E_1 vào khoảng cách D giữa các lớp, với các giá trị từ trường $B(30; 20; 10; 5; 2; 1; 0, 5; 0, 2)$	91
Hình 3.18. Sự phụ thuộc của mức năng lượng E_2 vào khoảng cách D giữa các lớp, với các giá trị từ trường $B(30; 20; 10; 5; 2; 1; 0, 5; 0, 2)$	92