

1. Làm nhóm. Xin xem file các yêu cầu làm nhóm
2. Làm report theo nhóm. Cấu trúc report theo cấu trúc bài báo.
3. Sẽ có buổi trình bày.

### Phương trình Bloch bán dẫn

Xét hệ bán dẫn gồm dải dẫn và dải hóa trị. Kích thích hệ bằng trường laser phù hợp thì electron ( $e$ ) ở dải hóa trị chuyển lên dải dẫn và để lại lỗ trống ( $h$ ) ở dải hóa trị. Quá trình động học của  $e, h$  trong mỗi dải được mô bởi phương trình (chuyển động) cho hàm phân bố  $f_{j,k}(t)$  của electron ( $j = e$ ) và lỗ trống ( $j = h$ ), và hàm phân cực  $p_k(t)$  (thể hiện mối tương quan giữa cặp electron dải dẫn và lỗ trống dải hóa trị) [ $\mathbf{k}$  (đậm) chỉ vector  $\vec{k}$ ]:

$$\frac{\partial f_{j,k}(t)}{\partial t} = -2\text{Im}[\Omega_k^R(t)p_k^*(t)] + \left. \frac{\partial f_{j,k}(t)}{\partial t} \right|_{\text{collision}} \quad j = e, h \quad (0.1a)$$

$$\frac{\partial p_k(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [e_{e,k}(t) + e_{h,k}(t)] p_k(t) + i[1 - f_{e,k}(t) - f_{h,k}(t)] \Omega_k^R(t) + \left. \frac{\partial p_k(t)}{\partial t} \right|_{\text{collision}} \quad (0.1b)$$

ở đây  $e_{j,k}(t)$  được gọi là năng lượng tái chuẩn hóa,  $\Omega_k^R(t)$  là tần số tái chuẩn hóa Rabi, và chúng được cho bởi

$$e_{j,k}(t) = \varepsilon_{j,k} - \sum_q V_q f_{j,k-q}(t) \quad (0.2a)$$

$$\hbar \Omega_k^R(t) = \frac{1}{2} d_k E(t) + \sum_q V_q p_{k-q}(t) \quad (0.2b)$$

với năng lượng chưa tái chuẩn hóa  $\varepsilon_{j,k}$ :  $\varepsilon_{e,k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \Delta_0$  và  $\varepsilon_{h,k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$ .  $\Delta_0$  được gọi là năng lượng trội của photon:  $\Delta_0 = \hbar \omega_0 - E_g$ , trong đó  $\hbar \omega_0$  là năng lượng photon và  $E_g$  khoảng cách (năng lượng) giữa dải dẫn và dải hóa trị. Trường (xung) laser (chỉ 1 xung) thường có dạng Gauss, được cho bởi  $E(t) = E_0 \exp\left[-\frac{t^2}{(\delta t)^2}\right]$ . Khi đó  $d_k E_0 = \frac{\hbar \sqrt{\pi}}{\delta t} \chi_0$ , với  $\chi_0$  là tham số cho cường độ của xung. Thế Coulomb  $V_q$  được cho bởi  $V_q = \frac{4\pi e^2}{V \varepsilon_0 q^2}$ ;  $\varepsilon_0$  là hằng số điện môi và  $V$  là thể tích.

Các số hạng  $\sum_q V_q f_{j,k-q}(t)$  và  $\sum_q V_q p_{k-q}(t)$  đến từ gần đúng Hartree – Fock.

$\left. \frac{\partial f_{j,k}(t)}{\partial t} \right|_{\text{collision}}, \left. \frac{\partial p_k(t)}{\partial t} \right|_{\text{collision}}$  mô tả quá trình bị chi phối bởi va chạm/tán xạ qua tương tác Coulomb or/and phonons. Các số hạng va chạm này sẽ được xử lý một cách gần đúng. Gần đúng thấp/thô nhất là gần đúng “hiện tượng luận”, trong đó,  $\left. \frac{\partial f_{j,k}(t)}{\partial t} \right|_{\text{col}} \rightarrow 0$  và  $\left. \frac{\partial p_k(t)}{\partial t} \right|_{\text{col}} \sim -\frac{p_k(t)}{T_2}$ , với  $T_2$  là “dephasing time” [thời gian khử pha] và được xác định từ thực nghiệm, và vì vậy, gần đúng này còn được gọi là gần đúng thời gian khử pha.

Hệ PT (0.1) trong gần đúng hiện tượng luận

$$\frac{\partial f_{j,k}(t)}{\partial t} = -2Im[\Omega_k^R(t)p_k^*(t)] \quad (0.3a)$$

$$\frac{\partial p_k(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [e_{e,k}(t) + e_{h,k}(t)] p_k(t) + i[1 - f_{e,k}(t) - f_{h,k}(t)] \Omega_k^R(t) - \frac{p_k(t)}{T_2} \quad (0.3b)$$

Trong gần đúng này, từ (0.3a), hàm phân bố của  $e$  và  $h$  như nhau nên có thể bỏ chỉ số  $j$  và gọi chung là  $f_k(t)$ . Thực tế thì hai hàm phân bố này phải khác nhau. Hệ PT (0.3) không thể giải một cách giải tích mà cần giải số.

### Các bước cần thực hiện

\* Đổi tổng theo xung lượng như sau

$$\sum_q V_q f_{j,k-q}(t) = \frac{4\pi e^2}{V\epsilon_0} \sum_q \frac{1}{q^2} f_{j,k-q}(t) = \frac{4\pi e^2}{V\epsilon_0} \sum_{k_1} \frac{1}{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)^2} f_{j,k_1}(t)$$

\* Và chuyển tổng theo xung lượng thành tích phân theo xung lượng: “Lý thuyết chất rắn” cho

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{k}$$

$$\sum_{k_1} \frac{1}{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)^2} f_{j,k_1}(t) \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)^2} f_{j,k_1}(t) d\mathbf{k}_1$$

\* Dùng tọa độ cầu

$$\int_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} \rightarrow \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty k^2 dk$$

$$\rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)^2} f_{j,k_1}(t) d\mathbf{k}_1 = \frac{V}{(2\pi)^3} 2\pi \int k_1^2 dk_1 \int_0^\pi \frac{\sin \theta}{(k^2 + k_1^2 - 2kk_1 \cos \theta)} f_{j,k_1}(t) d\theta$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^2} \int \frac{k_1}{k} \ln \left| \frac{k + k_1}{k - k_1} \right| f_{j,k_1}(t) dk_1 \xrightarrow{u_1=k_1^2} \frac{V}{8\pi^2} \int_0^\infty du_1 \frac{1}{\sqrt{u}} \ln \left| \frac{\sqrt{u} + \sqrt{u_1}}{\sqrt{u} - \sqrt{u_1}} \right| f_{j,u_1}(t)$$

$$\sum_q V_q f_{j,k-q}(t) \rightarrow \frac{4\pi e^2}{V\epsilon_0} \frac{V}{8\pi^2} \int_0^\infty du_1 \frac{1}{\sqrt{u}} \ln \left| \frac{\sqrt{u} + \sqrt{u_1}}{\sqrt{u} - \sqrt{u_1}} \right| f_{j,u_1}(t)$$

$$= \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \int_0^\infty du_1 \frac{1}{\sqrt{u}} \ln \left| \frac{\sqrt{u} + \sqrt{u_1}}{\sqrt{u} - \sqrt{u_1}} \right| f_{j,u_1}(t) \quad [*]$$

\* Vài ghi chú về các hằng số/ tham số/ biến số khác:

$$\epsilon_k \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \epsilon_{ek} + \epsilon_{hk} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left( \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \right); \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \rightarrow \epsilon_{jk} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_j} = \frac{\mu}{m_j} \epsilon_k$$

$$\text{Bán kính Bohr: } a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{e^2 \mu}$$

$$\text{Năng lượng liên kết: } E_R = \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} = \frac{e^2}{2\epsilon_0 a_0} \rightarrow \epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = E_R a_0^2 k^2 = E_R a_0^2 u \quad (u \text{ là biến trong tích phân } *)$$

Đối với GaAs:  $a_0 \approx 125\text{\AA}$ ,  $E_R = 4.2 \text{ meV}$ . Và chú ý  $\hbar = 658.5 \text{ meV fs}$  ( $1\text{fs} = 10^{-15}\text{s}$ )

\* Chuyển tích phân theo năng lượng ( $\varepsilon_1 \equiv \varepsilon_{k_1} = E_R a_0^2 u_1$ ,  $\varepsilon \equiv \varepsilon_k = E_R a_0^2 u$ ):

$$\sum_q V_q f_{j,k-q}(t) \rightarrow \frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0} \int_0^\infty du_1 \frac{1}{\sqrt{u}} \ln \left| \frac{\sqrt{u} + \sqrt{u_1}}{\sqrt{u} - \sqrt{u_1}} \right| f_{j,u_1}(t) = \frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \int_0^\infty d\varepsilon_1 \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \ln \left| \frac{\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon_1}}{\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon_1}} \right| f_{j,\varepsilon_1}(t)$$

$$g(\varepsilon, \varepsilon_1) \equiv \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \ln \left| \frac{\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon_1}}{\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon_1}} \right|$$

$$\sum_q V_q f_{j,k-q}(t) \rightarrow \frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \int_0^\infty d\varepsilon_1 g(\varepsilon, \varepsilon_1) f_{j,\varepsilon_1}(t)$$

Hoàn toàn tương tự:

$$\sum_q V_q p_{k-q}(t) \rightarrow \frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \int_0^\infty d\varepsilon_1 g(\varepsilon, \varepsilon_1) p_{\varepsilon_1}(t)$$

$$\begin{aligned} e_{e,k}(t) + e_{h,k}(t) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} - \Delta_0 - \frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \int_0^\infty d\varepsilon_1 g(\varepsilon, \varepsilon_1) [f_{e,\varepsilon_1}(t) + f_{h,\varepsilon_1}(t)] \\ &= \varepsilon - \Delta_0 - \frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \int_0^\infty d\varepsilon_1 g(\varepsilon, \varepsilon_1) [f_{e,\varepsilon_1}(t) + f_{h,\varepsilon_1}(t)] \equiv \varepsilon - \Delta_0 - E_\varepsilon \end{aligned}$$

\* SBE theo năng lượng:

$$\frac{\partial f_{j,\varepsilon}(t)}{\partial t} = -2Im[\Omega_\varepsilon^R(t) p_\varepsilon^*(t)] \quad (0.4a)$$

$$\frac{\partial p_\varepsilon(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\varepsilon - \Delta_0 - E_\varepsilon] p_\varepsilon(t) + i[1 - f_{e,\varepsilon}(t) - f_{h,\varepsilon}(t)] \Omega_\varepsilon^R(t) - \frac{p_\varepsilon(t)}{T_2} \quad (0.4b)$$

\* Rời rạc hoá tích phân  $\rightarrow$  tổng

**Đề giải số** cần thực hiện “rời rạc hóa”. Phân chia năng lượng thành  $N$  đoạn:

$$\varepsilon = n\Delta\varepsilon, n = 1, \dots, N; \Delta\varepsilon = \frac{\varepsilon_{max}}{N}, \varepsilon_{max} = 300 \text{ meV.}$$

Hệ phương trình tính số có dạng

$$\frac{\partial f_n(t)}{\partial t} = -2Im[\Omega_n^R(t) p_n^*(t)] \quad (0.5a)$$

$$\frac{\partial p_n(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [n\Delta\varepsilon - \Delta_0 - E_n] p_n(t) + i[1 - 2f_n(t)] \Omega_n^R(t) - \frac{p_n(t)}{T_2} \quad (0.5b)$$

với

$$E_\varepsilon \rightarrow E_n = \frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \Delta\varepsilon \sum_{n_1=1}^N g(n, n_1) [f_{e,n_1}(t) + f_{h,n_1}(t)], \quad g(n, n_1) = \frac{1}{\sqrt{n\Delta\varepsilon}} \ln \left| \frac{\sqrt{n} + \sqrt{n_1}}{\sqrt{n} - \sqrt{n_1}} \right|.$$

$$\Omega_n^R(t) = \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{1}{2} \frac{\hbar\sqrt{\pi}}{\delta t} \chi_0 e^{-\frac{t^2}{\delta t^2}} + \frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \Delta\varepsilon \sum_{n_1=1}^N g(n, n_1) p_{n_1}(t) \right]$$

\* Điều kiện ban đầu: [để ý rằng  $p_n(t)$  là số phức]

$$f_{e,n}(t = t_0) = f_{h,n}(t = t_0) = 0; p_n(t = t_0) = 0$$

Thời gian ban đầu  $t_0$  thường được chọn khoảng  $t_0 = -3 \times \delta t$  ( $\delta t$  là bề rộng xung laser).

\* Vài tham số khác:  $\chi_0 = 0.1, \dots, 2$ ;  $\delta t = 25$  fs;  $\Delta_0 = 30$  meV;  $dt = 2$  fs;  $t_{max} = 500$  fs (thời gian cuối). Chọn số khoảng chia năng lượng  $N = 100$

\* **Các đại lượng cần quan tâm:**  $f_{e,n}(t), f_{h,n}(t), p_n(t)$ ; mật độ toàn phần  $N(t) = \sum_k f_{e,k}(t)$ ; suất của tổng hàm phân cực  $|P(t)| = |\sum_{\vec{k}} p_{\vec{k}}(t)|$ . Trong biểu thức của  $N(t)$  và  $|P(t)|$  cũng cần biến đổi tổng theo  $\vec{k}$  thành tổng theo năng lượng  $\varepsilon$ :  $\varepsilon \equiv \varepsilon_k = E_R a_0^2 u$

$$N(t) = 2 \sum_k f_{e,k}(t) \rightarrow C_0 \sum_{n=1}^N \sqrt{n} f_{e,n}(t), \quad C_0 = ???$$

$$P(t) = \sum_k p_k(t) = \dots \propto \Delta \varepsilon \sqrt{\Delta \varepsilon} \sum_{n=1}^N \sqrt{n} f_{e,n}(t)$$

Ngoài ra còn đại lượng cần quan tâm là phổ hấp thụ  $\alpha(\omega) \propto \text{Im}[P(\omega)/E(\omega)]$ .  $P(\omega), E(\omega)$  được xác định bằng phép biến đổi Fourier của  $P(t), E(t)$ :

$$E(\hbar\omega) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} dt E(t) e^{i\hbar\omega t}, \quad P(\hbar\omega) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} dt P(t) e^{i\hbar\omega t}$$

$E(\hbar\omega)$  có dạng Gauss do  $E(t)$  dạng Gauss. Ta quan tâm đến vùng cộng hưởng (vùng lân cận của năng lượng photon) vì thế chỉ nên giới hạn  $\hbar\omega$  quanh  $\hbar\omega_0$ . Tích phân theo  $t$  trong phương trình trên có thể được “rời rạc” hoá theo tổng Riemann:  $\int_{-\infty}^{+\infty} dt P(t) e^{i\hbar\omega t} \rightarrow \Delta t \sum_n P(t_n) \dots$

\* Tính phổ hấp thụ với một số giá trị  $T_2$  khác nhau: lớn (khoảng vài trăm fs), ... nhỏ ( $\sim 10$  fs). Nếu  $T_2$  lớn thì cần phải chọn  $t_{max}$  đủ lớn cho đến khi  $P(t)$  (gần như) bằng không. Hãy so sánh phổ hấp thụ khi có và không có tương tác Coulomb (gần đúng Hartree-Fock). Việc dùng gần đúng hiện tượng luận  $T_2$  làm cho phổ hấp thụ không có dáng điệu “lý tưởng” như mong đợi, nhưng cũng đủ để quan sát thấy vai trò của thể Coulomb đối với exciton.

Để có thể quan sát được exciton trong phổ hấp thụ, cần phải xét  $T_2$  phụ thuộc thời gian, có dạng thức như sau:

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_2^0} + \gamma N(t)$$

Trong đó  $T_2^0 = 210$  fs,  $\gamma = 6.5 \times 10^{-20} \text{ cm}^3 \text{ fs}^{-1}$ ,  $N(t)$  là mật độ toàn phần của electron trên dải dẫn.