

PHƯƠNG TRÌNH BLOCH BÁN DẪN TRONG GẦN ĐÚNG THỜI GIAN KHỬ PHA

Phạm Hoàng Minh Quang, Trương Anh Duy, Thạch Thị Huyền Trân, Nguyễn Lê Khải Hoàn, and Sơn Hoài Ân
VNUHCM - University of Science, 227 Nguyen Van Cu, District 5, Ho Chi Minh City 70000, Vietnam

(Dated: Ngày 3 tháng 1 năm 2025)

Bài báo sử dụng phương pháp Runge-Kutta bậc 4 (RK4) cùng gần đúng thời gian khử pha để mô phỏng động lực học của hệ bán dẫn dưới kích thích quang học. Kết quả chỉ ra rằng hàm phân bố electron và hàm phân cực phản ánh tính coherence của xung laser. Hiện tượng đảo nghịch quần thể xuất hiện ở cường độ xung cao, mở ra tiềm năng ứng dụng trong laser bán dẫn. Phổ hấp thụ cho thấy đỉnh exciton biến mất tại cường độ lớn, giải thích các cơ chế phi tuyến như va chạm electron. Tuy nhiên, gần đúng thời gian khử pha còn hạn chế trong việc mô phỏng các tương tác phi tuyến phức tạp. Nghiên cứu tương lai sẽ tích hợp các hiệu ứng phi tuyến và các tương tác nâng cao, cải thiện độ chính xác và mở rộng khả năng ứng dụng của mô hình trong các thiết bị quang điện tử tiên tiến.

I. GIỚI THIỆU

Để mô tả điện động lực của vật chất, cần có các phương trình đặc trưng liên hệ mật độ điện tích cảm ứng ρ và mật độ dòng \mathbf{j} của chất bán dẫn (hoặc tương đương là phân cực \mathbf{P} với $\mathbf{j} = \dot{\mathbf{P}}$ và $\rho = -\nabla \cdot \mathbf{P}$) với các trường điện từ \mathbf{E}, \mathbf{B} . Các mô hình phổ biến trong lĩnh vực này bao gồm:

- Dao động tử Lorentz: mô phỏng electron như một dao động tử điều hòa bị suy giảm dưới tác động của lực điều khiển. Trong mô hình này electron được nối với lò xo có hằng số lực là C . Lực điều khiển là trường điện dao động. Trường điện dao động tạo ra một mô men lưỡng cực dao động
- Hạt tự do Drude: mô hình Drude là một trong những mô hình đầu tiên đưa ra ý tưởng khí electron tự do di chuyển giữa các lõi ion mang điện dương

Để mô tả tính chất phi tuyến của vật chất, thường sử dụng khai triển chuỗi lũy thừa của phân cực theo trường điện. Tuy nhiên, cách khai triển này không phù hợp với các điều kiện cộng hưởng và gần cộng hưởng.

Khi tần số của trường điện gần bằng tần số tự nhiên của hệ (tức là tần số cộng hưởng), các phản ứng của hệ vật chất trở nên mạnh mẽ và không tuyến tính. Trường điện có thể gây ra sự cộng hưởng trong các trạng thái electron, dẫn đến sự thay đổi lớn trong phân cực mà không thể được mô tả một cách chính xác bằng cách mở rộng tuyến tính (chuỗi lũy thừa đơn giản). Điều này xảy ra bởi vì các hiệu ứng bậc cao hơn trong chuỗi lũy thừa trở nên quan trọng và cần phải được tính đến.

Trong một số trường hợp, các nghiệm mới có thể xuất hiện "tự phát" khi vượt qua một mức độ trường ánh sáng tối hạn, dẫn đến hiện tượng tạo ra sóng hài bậc hai. Đây là một hiện tượng trong quang học phi tuyến, trong đó hai photon có tần số ω tác động với một môi trường phi tuyến để tạo ra một photon mới có tần số gấp đôi là 2ω . Mặc dù vậy, một khai triển lũy thừa (bao gồm cả các hạng chẵn theo trường ánh sáng) không tồn tại trong trường hợp này.

Do đó, một mô tả thực tế về quang học bán dẫn đòi hỏi sự phụ thuộc đúng đắn vào trường ánh sáng, bao gồm:

- Trạng thái liên tục của dải hóa trị dẫn,
- Hiệu ứng exciton,
- Động lực học làm đầy band.

Các hiện tượng này được mô tả nhất quán bằng **Phương trình Bloch trong Bán dẫn** (*Semiconductor Bloch Equations, SBE*), hiện nay đã trở thành mô hình chuẩn của quang học bán dẫn.

Trong cách tiếp cận này, chất bán dẫn được xử lý theo cơ học lượng tử, dẫn đến một tập hợp các phương trình vi phân phi tuyến kết hợp cho phân cực và các hàm phân bố electron/lỗ trống (bổ sung thêm các hàm tương quan bậc cao, nhưng sẽ được bỏ qua ở đây). Phân cực sau đó hoạt động như một thành phần nguồn trong phương trình Maxwell (cổ điển). Theo cách này, *Phương trình Bloch trong Bán dẫn* (SBE) là một lý thuyết bán cổ điển.

SBE mô tả thành công cả các hiện tượng tuyến tính lẫn phi tuyến như:

- Các thí nghiệm bơm-dò (*pump-probe experiments*),
- Trộn bốn sóng (*four-wave-mixing*),
- Hồi âm photon (*photon-echo experiments*).

Chúng ta có thể tiếp cận *Phương trình Bloch trong Bán dẫn* (SBE) qua ba bước như sau:

- Nghiên cứu động lực học của nguyên tử gần cộng hưởng:** Trong xấp xỉ hai mức năng lượng, dẫn xuất các phương trình Bloch quang học. Các quá trình suy giảm cũng có thể được đưa vào ở mức độ hiện tượng học trong cách trình bày này.
- Tổng quát hóa cho mô hình hai dải:** Tổng quát hóa kết quả từ bước trước cho một mô hình hai dải của chất bán dẫn trực tiếp, bỏ qua tương tác Coulomb giữa các electron và lỗ trống. Trong cách mô tả này, chất bán dẫn được phác thảo như một tập hợp các hệ hai mức (*two-level systems, TLS*) không tương tác.

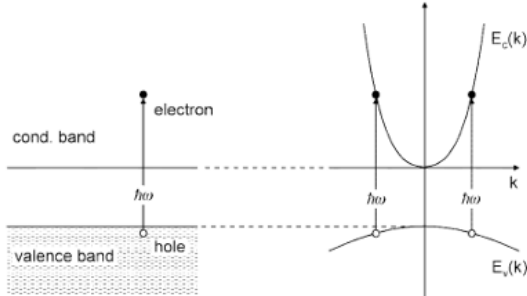
3. **Bổ sung tương tác Coulomb:** Bổ sung tương tác Coulomb giữa các cặp electron-lỗ trống, bao gồm cả hiệu ứng exciton và sàng lọc. Điều này dẫn đến *Phương trình Bloch trong Bán dẫn* (SBE) ở dạng đơn giản nhất, trong đó bao gồm cả exciton.

II. PHƯƠNG PHÁP LUẬN

Gần đúng Hartree–Fock (HF) là một phương pháp xấp xỉ để mô tả trạng thái của một hệ nhiều hạt. Phương pháp này dựa trên các ý tưởng chính sau:

- **Trường hiệu dụng:** Tương tác giữa các hạt (ví dụ: electron-electron, lỗ-lỗ, hoặc electron-lỗ) được xấp xỉ thông qua một trường hiệu dụng, thay vì xét từng tương tác riêng lẻ. Điều này giúp đơn giản hóa bài toán nhiều hạt phức tạp.
- **Thông tin lượng tử toàn cục:** Việc tính toán trường hiệu dụng yêu cầu tổng hợp thông tin về tất cả các trạng thái lượng tử khả dĩ, được thể hiện qua các hàm sóng hoặc ma trận mật độ của hệ.

Trong bài toán cụ thể này, chúng ta xét một hệ bán dẫn bao gồm *dải dẫn* và *dải hóa trị* như hình sau. Mô tả gần đúng Hartree–Fock sẽ đóng vai trò nền tảng để tiếp cận các hiện tượng lượng tử trong chất bán dẫn, như tương tác Coulomb và các hiệu ứng phi tuyến.



Hình 1. Cấu trúc dải năng lượng của chất bán dẫn

Khi hệ được kích thích bằng trường laser (tia laser có dạng Gauss) 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 này là chuyển dời thẳng (vuông góc), và trong nhiều trường hợp, đây là một gần đúng tốt vì khi kích thích electron từ dải hóa trị lên dải dẫn, sự thay đổi về vector sóng thường không lớn. Điều này giúp giảm bớt sự phức tạp trong mô hình và có thể tính toán được các quá trình mà không cần phải xem xét tất cả các yếu tố chi tiết về sự thay đổi vector sóng.

Quá trình động học của electron (e) và lỗ trống (h) trong mỗi dải được mô tả bởi phương trình (chuyển động) cho hàm phân bố $f_{j,\mathbf{k}}(t)$ của electron tại $j = e$ và phân bố của lỗ trống tại $j = h$. Hàm phân cực $p_{\mathbf{k}}$ thể hiện mối

tương quan giữa cặp electron dải dẫn và lỗ trống dải hóa trị.

Trong bài toán này, ta quan tâm đến:

- Mật độ electron (e) ở dải dẫn.
- Mật độ lỗ trống (h) ở dải hóa trị.
- Tương quan giữa electron và lỗ trống \rightarrow exciton (X).

Ma trận mật độ (Density Matrix): Ma trận mật độ giúp mô tả sự phân bố các electron và lỗ trống trong các dải năng lượng của vật liệu. Các phần tử trong ma trận này không chỉ phản ánh sự phân bố các hạt, mà còn thể hiện mối quan hệ tương tác giữa electron và lỗ trống, điều này ảnh hưởng đến các quá trình quang học như hấp thụ và phân cực.

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{cc} & \rho_{cv} \\ \rho_{vc} & \rho_{vv} \end{pmatrix}, \quad (\text{II.1})$$

trong đó $\rho_{cc} = f_e$ là hàm phân bố electron trong dải dẫn, $\rho_{vv} = 1 - f_h$ ($f_h > 0$) là hàm phân bố lỗ trống trong dải hóa trị và $\rho_{cv} \rightarrow p_{\mathbf{k}}(t)$ biểu diễn hàm phân cực, từ đó giúp xác định được phổ hấp thụ.

Hệ phương trình mô tả động học của electron và lỗ trống trong không gian sóng \mathbf{k} là:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{j,\mathbf{k}}(t)}{\partial t} &= -2\text{Im} [\Omega_{\mathbf{k}}^R(t) p_{\mathbf{k}}^*(t)] + \left. \frac{\partial f_{j,\mathbf{k}}(t)}{\partial t} \right|_{\text{collision}} \\ \frac{\partial p_{\mathbf{k}}(t)}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} [e_{e,\mathbf{k}}(t) + e_{h,\mathbf{k}}(t)] p_{\mathbf{k}}(t) \\ &\quad + i [1 - f_{e,\mathbf{k}}(t) - f_{h,\mathbf{k}}(t)] \Omega_{\mathbf{k}}^R(t) + \left. \frac{\partial p_{\mathbf{k}}(t)}{\partial t} \right|_{\text{collision}}. \end{aligned} \quad (\text{II.2})$$

Hệ số $1 - f_{e,\mathbf{k}}(t) - f_{h,\mathbf{k}}(t)$ đại diện cho sự đảo ngược mật độ tại điểm \mathbf{k} (tức là khả năng không có electron và không có lỗ trống tại điểm này). Nó thể hiện trạng thái trống ở điểm \mathbf{k} , và ảnh hưởng của nó đến sự hấp thụ quang học, được gọi là "lấp đầy không gian pha." Điều này ám chỉ sự thiếu hụt các trạng thái trống, khiến photon có thể được hấp thụ. Khi không gian pha đã được "lấp đầy" bởi các electron và lỗ trống, khả năng hấp thụ ánh sáng sẽ bị hạn chế.

Thành phần $-2\text{Im} [\Omega_{\mathbf{k}}^R(t) p_{\mathbf{k}}^*(t)]$ mô tả sự tạo ra các cặp electron-lỗ trống do sự hấp thụ ánh sáng.

Năng lượng tái chuẩn hóa $e_{j,\mathbf{k}}(t)$, với $j = e, h$, được tính bằng:

$$e_{j,\mathbf{k}}(t) = \epsilon_{j,\mathbf{k}} - V_{\mathbf{q}} f_{j,\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t), \quad (\text{II.3})$$

với $\epsilon_{e,\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \Delta_0$ và $\epsilon_{h,\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} + \Delta_0$ là năng lượng chưa tái chuẩn hóa của electron và lỗ trống, bao gồm cả tương tác với các electron và lỗ trống khác. Thêm vào

đó, Δ_0 được gọi là năng lượng trội của photon (độ bơm để electron đi sâu vào dải dẫn): $\Delta_0 = \hbar\omega_0 - E_g$, trong đó $\hbar\omega_0$ là năng lượng photon và E_g khoảng cách (năng lượng) giữa dải dẫn và dải hóa trị

Tần số tái chuẩn hóa Rabi $\Omega_R(k, t)$ mô tả cường độ và tần số của sự tương tác giữa trường laser và hệ. Phần đầu tiên trong phương trình đại diện cho sự tương tác trực tiếp giữa trường laser và electron/lỗ trống, trong khi phần thứ hai mô tả sự tương tác gián tiếp giữa các hạt trong hệ, thông qua sự phân cực của chúng. Được xác định bằng công thức

$$\hbar\Omega_{\mathbf{k}}^R(t) = \frac{1}{2}d_{\mathbf{k}}E(t) + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}p_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t). \quad (\text{II.4})$$

Giải thích số hạng đầu tiên

Trong quá trình va chạm, có hai cơ chế chính ảnh hưởng đến thời gian sống của electron và lỗ trống: phonon và Coulomb. Va chạm này dẫn đến sự thay đổi trong phân bố của electron và lỗ trống. Ta có:

$$\dot{f}_{\text{col}} \rightarrow f_0 - f \frac{1}{T_1}, \quad (\text{II.5})$$

trong đó:

- f_0 là phân bố cân bằng của dải Fermi-Dirac, mô tả trạng thái cân bằng của hệ mà không có sự kích thích hoặc va chạm.
- T_1 là thời gian sống, tức là thời gian mà một electron hoặc lỗ trống giữ được trạng thái của nó trước khi bị thay đổi do va chạm.

Khi $T_1 \rightarrow \infty$, có nghĩa là thời gian sống của các electron và lỗ trống là rất dài. Điều này cho thấy va chạm rất yếu và gần như không xảy ra trong hệ. Khi đó, phương trình va chạm $\dot{f}_{\text{col}} \rightarrow 0$, tức là không có sự thay đổi nào trong phân bố của các hạt do va chạm.

Trường laser kích thích thường có dạng Gauss được cho bởi

$$E(t) = E_0 \exp \left[-\frac{t^2}{(\delta t)^2} \right] \cos(\omega_0 t) \quad (\text{II.6})$$

$$= E_0 \exp \left[-\frac{t^2}{(\delta t)^2} \right] \frac{e^{-i\omega_0 t} + e^{i\omega_0 t}}{2}, \quad (\text{II.7})$$

khi ta khai triển Fourier thành phần $\frac{e^{-i\omega_0 t} + e^{i\omega_0 t}}{2}$, ta được: $e^{-i\omega_0 t} \propto \frac{1}{\omega - \omega_0}$ có cộng hưởng và $e^{i\omega_0 t} \propto \frac{1}{\omega + \omega_0}$ không có cộng hưởng. Khi bơm xung thì ω thay đổi gần với ω_0 . Do đó, $\omega + \omega_0 > \omega - \omega_0$ nên ta suy ra

$$\frac{1}{\omega + \omega_0} < \frac{1}{\omega - \omega_0}, \quad (\text{II.8})$$

điều này ngụ ý rằng phần $e^{i\omega_0 t}$ dao động quá nhanh vì thế có thể bỏ qua, trung bình dao động gần như bằng không.

Đây được gọi là gần đúng sóng quay (RWA). Ngoài ra, chú ý rằng E_0 thay đổi rất chậm và vì thế ta có thể áp dụng gần đúng hàm bao lên trường điện từ dẫn đến việc có thể bỏ qua số hạng $e^{-i\omega_0 t}$ mà không gây ảnh hưởng đến kết quả. Do đó, trường laser kích thích được xấp xỉ thành

$$E(t) \approx E_0 \exp \left[-\frac{t^2}{(\delta t)^2} \right]. \quad (\text{II.9})$$

Khi đó

$$d_{\mathbf{k}}E_0 = \frac{\hbar\sqrt{\pi}}{\delta t}\chi_0, \quad (\text{II.10})$$

trong đó χ_0 là tham số cho cường độ xung, $d_{\mathbf{k}}$ là mô men động lượng.

Giải thích số hạng thứ hai

Các số hạng $\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}f_{j,\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)$ và $\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}p_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)$ đến từ gần đúng Hartree-Fock được giải thích như sau:

Số hạng $\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}f_{j,\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)$:

- $f_{j,\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)$ là ma trận mật độ biểu diễn sự phân bố hạt tại trạng thái lượng tử $(j, \mathbf{k} - \mathbf{q})$ tại thời điểm t . Nó mô tả sự chiếm đóng của các mức năng lượng hoặc trạng thái $(j, \mathbf{k} - \mathbf{q})$.
- $V_{\mathbf{q}}$ là thế Coulomb trong không gian sóng (là biến đổi Fourier của thế Coulomb ở không gian thực). Nó phụ thuộc và mô men động lượng \mathbf{q} .
- Ý nghĩa vật lý: Số hạng này mô tả tương tác Coulomb giữa hạt tại trạng thái \mathbf{k} và toàn bộ các trạng thái khác (lấy tổng qua \mathbf{q}). Đây là đóng góp **Hatree**, biểu diễn lực đẩy Coulomb giữa các điện tử (trong trường hợp f) hoặc giữa các lỗ trống

Số hạng $\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}p_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)$:

- $p_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)$ là yếu tố tương quan (coherence) giữa trạng thái điện tử và lỗ trống mô men động lượng $\mathbf{k} - \mathbf{q}$. Nó liên quan đến sự chuyển đổi giữa trạng thái bị kích thích và trạng thái cơ bản, được mô tả bởi sự phân cực $p(t)$.
- Ý nghĩa vật lý: Số hạng này mô tả tương tác Coulomb giữa điện tử và lỗ trống. Đây là đóng góp **Fock**, thể hiện lực hút Coulomb hiệu dụng giữa các điện tử và lỗ trống qua trung gian tương tác.

Cuối cùng, số hạng $\left. \frac{\partial f_{j,\mathbf{k}}(t)}{\partial t} \right|_{\text{collision}}, \left. \frac{\partial p_{\mathbf{k}}(t)}{\partial t} \right|_{\text{collision}}$ mô tả quá trình bị chi phối bởi va chạm/tán xạ qua tương tác Coulomb/phonon. Các số hạng va chạm này sẽ được xử lý một cách gần đúng. Gần đúng đơn giản nhất được áp dụng trong bài này là gần đúng "hiện tượng luận"

$$\left. \frac{\partial f_{j,\mathbf{k}}(t)}{\partial t} \right|_{\text{col}} \rightarrow 0, \quad \left. \frac{\partial p_{\mathbf{k}}(t)}{\partial t} \right|_{\text{col}} \sim -\frac{p_{\mathbf{k}}(t)}{T_2}. \quad (\text{II.11})$$

Như đã nói ở trên, hàm phân cực $p(t)$ thường thể hiện cho mối quan hệ giữa electron và lỗ trống trong các dải. Khi một hệ bị kích thích bởi một xung ánh sáng như tia laser, electron sẽ nhảy từ dải hóa trị lên dải dẫn và để lại một lỗ trống. Mối quan hệ giữa electron và lỗ trống trong các dải này thay đổi theo thời gian, điều này gây ra sự thay đổi trong phân cực của hệ. Tuy nhiên, khi có sự tương tác giữa electron và lỗ trống, cũng như các quá trình tán xạ giữa chúng (do va chạm với nhau hoặc với các tác nhân bên ngoài như phonon hay các tạp chất), sự phân cực này sẽ không duy trì được ổn định và sẽ mất dần theo thời gian. Quá trình mất đi này được gọi là khử pha, trong đó sự đồng pha giữa các trạng thái bị phá vỡ do sự tán xạ hoặc tương tác với môi trường. Trong công thức (II.11), T_2 được gọi là thời gian khử pha (dephasing time) được xác định từ thực nghiệm và sẽ tắt dần để biểu thị cho tốc độ phân cực giảm dần theo thời gian được xác định bởi công thức

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_2^0} + \gamma N(t), \quad (\text{II.12})$$

trong đó số hạng đầu là số hạng tương tác phonon, số hạng thứ hai là số hạng tương tác Coulomb với $N(t)$ là mật độ toàn phần của electron trên dải dẫn. Ngoài ra, gần đúng này còn có một tên gọi khác là gần đúng thời gian khử pha.

Hệ phương trình (II.2) sau khi áp dụng gần đúng thời gian khử pha trở thành

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{j,\mathbf{k}}(t)}{\partial t} &= -2\text{Im} [\Omega_{\mathbf{k}}^R(t) p_{\mathbf{k}}^*(t)], \\ \frac{\partial p_{\mathbf{k}}(t)}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} [e_{e,\mathbf{k}}(t) + e_{h,\mathbf{k}}(t)] p_{\mathbf{k}}(t) \\ &+ i [1 - f_{e,\mathbf{k}}(t) - f_{h,\mathbf{k}}(t)] \Omega_{\mathbf{k}}^R(t) + \frac{p_{\mathbf{k}}(t)}{T_2}. \end{aligned} \quad (\text{II.13})$$

Trong gần đúng trên, hàm phân bố của e và h được xem là như nhau nên ta có thể bỏ đi chỉ số j trong công thức và gọi chung là $f_{\mathbf{k}}(t)$. Nhưng hãy nhớ rằng, trong thực tế thì hai hàm phân bố này được giải khác nhau. Ngoài ra, có thể thấy hệ phương trình (II.13) không thể giải bằng phương pháp giải tích thông thường mà cần thực hiện giải số. Phương pháp giải số được dùng trong bài này là phương pháp Runge-Kutta bậc 4 (RK4).

Đầu tiên, ta cần đổi hệ phương trình (II.13) từ không gian sóng \mathbf{k} sang không gian năng lượng

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{j,\varepsilon}(t)}{\partial t} &= -2\text{Im} [\Omega_{\varepsilon}^R(t) p_{\varepsilon}^*(t)], \\ \frac{\partial p_{\varepsilon}(t)}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} [\varepsilon - \Delta_0 - E_{\varepsilon}] p_{\varepsilon}(t) \\ &+ i [1 - f_{e,\varepsilon}(t) - f_{h,\varepsilon}(t)] \Omega_{\varepsilon}^R(t) + \frac{p_{\varepsilon}(t)}{T_2}. \end{aligned} \quad (\text{II.14})$$

Tiếp theo thực hiện phân chia năng lượng thành N đoạn (thực hiện rời rạc hóa năng lượng)

$$\varepsilon = n\Delta\varepsilon, \quad (n = 1, \dots, N); \quad \Delta\varepsilon = \frac{\varepsilon_{max}}{N} \quad (\varepsilon_{max} = 300\text{meV}). \quad (\text{II.15})$$

Hệ phương trình (II.14) trở thành

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_n(t)}{\partial t} &= -2\text{Im} [\Omega_n^R(t) p_n^*(t)], \\ \frac{\partial p_n(t)}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} [n\Delta\varepsilon - \Delta_0 - E_n] p_n(t) \\ &+ i [1 - 2f_n(t)] \Omega_n^R(t) + \frac{p_n(t)}{T_2}. \end{aligned} \quad (\text{II.16})$$

với

$$E_{\varepsilon} \rightarrow E_n = \sqrt{\frac{E_R}{\pi}} \Delta\varepsilon \sum_{n_1=1}^N g(n, n_1) [f_{e,n_1}(t) + f_{h,n_1}(t)], \quad (\text{II.17})$$

$$g(n, n_1) = \frac{1}{\sqrt{n\Delta\varepsilon}} \ln \left| \frac{\sqrt{n} + \sqrt{n_1}}{\sqrt{n} - \sqrt{n_1}} \right|, \quad (\text{II.18})$$

$$\Omega_n^R(t) = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{1}{2} \hbar \sqrt{\pi} \frac{\chi_0}{\delta t} e^{-\frac{t^2}{\delta t^2}} + \sqrt{\frac{E_R}{\pi}} \Delta\varepsilon \sum_{n_1=1}^N g(n, n_1) p_{n_1}(t) \right]. \quad (\text{II.19})$$

III. KẾT QUẢ GIẢI SỐ

Khi thực hiện giải số, ta áp dụng điều kiện ban đầu

$$\begin{aligned} f_{e,n}(t=t_0) &= f_{h,n}(t=t_0) = 0, \\ p_n(t=t_0) &= 0, \end{aligned} \quad (\text{III.1})$$

với thời gian ban đầu $t_0 = -3\delta t$ trong đó δt là bề rộng của xung laser.

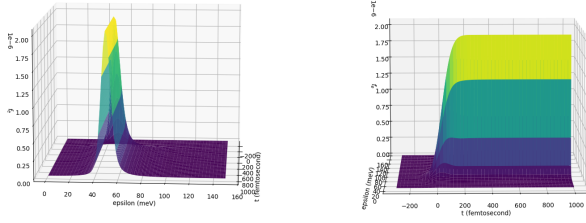
A. Hàm Phân Bố Electron Và Hàm Phân Cực

Đối với hàm phân bố electron khi ta sử dụng xung laser có dạng Gauss được đề cập ở phương trình (II.9) thì hàm phân bố electron cũng sẽ mang điệu của hàm phân bố Gauss. Điều này được dự đoán là vì laser có đặc tính coherence

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{coh} + \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{col}, \quad (\text{III.2})$$

trong thời gian rất ngắn ban đầu, hiện tượng va chạm chưa xảy ra. Do đó, khi vừa bơm lên electron sẽ bị đồng bộ với xung laser, sau đó số hạng va chạm mới xuất hiện.

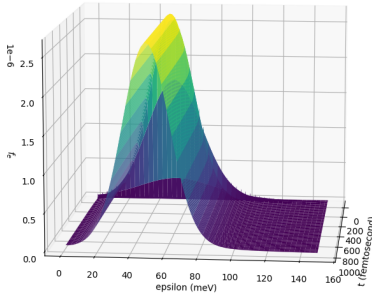
Ở đây, ta thấy hàm phân bố electron có đỉnh tại năng lượng 50 meV nhưng năng lượng trội photon $\Delta_0 = 100\text{meV}$. Điều này xảy ra là vì ta đã xem $f_e = f_h$ nên về nguyên tắc năng lượng phải chia đôi. Thêm vào đó như đã được trình bày ở trên, theo thực tế sau khi bơm lên thì số hạng va chạm sẽ xuất hiện nhưng theo hình



Hình 2. Hàm phân bố electron với thông số bề rộng xung $\delta_t = 100 \text{ fs}$ và năng lượng trội photon $\Delta_0 = 100 \text{ meV}$.

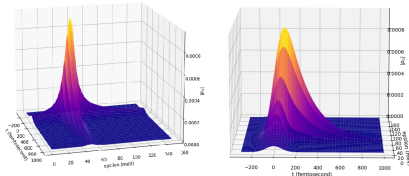
ta lại không thấy sự xuất hiện của số hạng va chạm. Lý do là vì gần đúng thời gian khử pha được dùng trong bài toán này ta đã bỏ qua số hạng tương tác được thể hiện ở phương trình (II.11) vì thế electron được bơm lên thế nào thì sẽ nằm nguyên ở đó và hình 2 đã diễn tả rất chính xác điều này.

Một tính chất nữa có thể được khảo sát của xung laser là nếu bề rộng xung δ_t càng nhỏ thì độ rộng theo trục năng lượng càng lớn được thể hiện rõ qua hình 3



Hình 3. Hàm phân bố electron với bề rộng xung $\delta_t = 25 \text{ fs}$ và năng lượng trội photon $\Delta_0 = 100 \text{ meV}$.

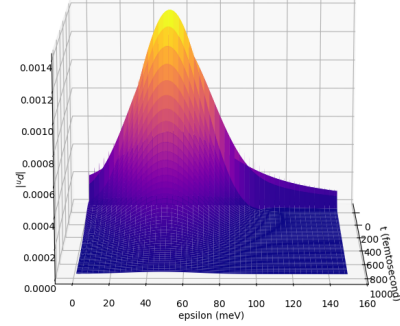
Vì ta sử dụng xung laser có dạng Gauss để kích thích, do đó hàm phân cực cũng sẽ mang dạng Gauss như hình 4



Hình 4. Hàm phân cực với bề rộng xung $\delta_t = 100 \text{ fs}$ và năng lượng trội photon $\Delta_0 = 100 \text{ meV}$.

Có thể thấy được, hàm phân cực có dạng Gauss và cũng có đỉnh tại mức năng lượng 50 meV như hàm phân bố electron. Tuy nhiên, theo như gần đúng thời gian khử pha được áp dụng trong bài này, số hạng tương tác của

hàm phân cực vẫn được xét đến thể hiện ở phương trình (II.11). Do đó, sẽ dẫn đến hiện tượng tắt dần mà ta thấy ở hình 4 khi bắt đầu qua thời điểm $t = 0$ thì bắt đầu giảm. Ngoài ra, độ rộng theo trục năng lượng của hàm phân cực cũng chịu ảnh hưởng từ bề rộng xung như hàm phân bố electron được biểu thị ở hình 5



Hình 5. Hàm phân cực với bề rộng xung $\delta_t = 25 \text{ fs}$ và năng lượng trội photon $\Delta_0 = 100 \text{ meV}$.

B. Mật Độ Toàn Phần Và Tổng Hàm Phân Cực

Ngoài hàm phân bố electron và hàm phân cực được giải ra trực tiếp từ phương trình (II.16). Ta còn quan tâm đến hàm mật độ toàn phần của electron trên dải dẫn và hàm tổng phân cực được xác định theo công thức

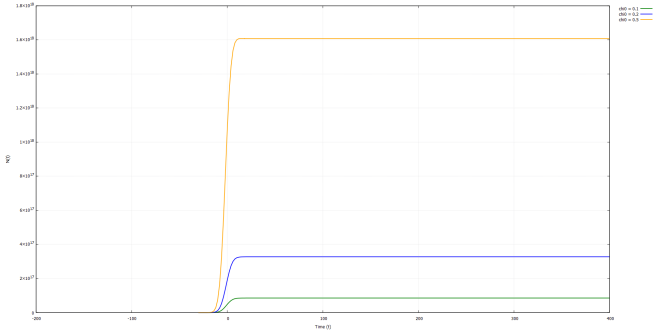
$$N(t) = \sum_{\mathbf{k}} f_{e,\mathbf{k}}(t) + \sum_{\mathbf{k}} f_{h,\mathbf{k}}(t) \rightarrow N(t) = C_0 \sum_{n=1}^N \sqrt{n} f_n(t), \quad (\text{III.3})$$

$$P(t) = \sum_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}}(t) \propto \Delta \epsilon \sqrt{\Delta \epsilon} \sum_{n=1}^N \sqrt{n} p_n(t). \quad (\text{III.4})$$

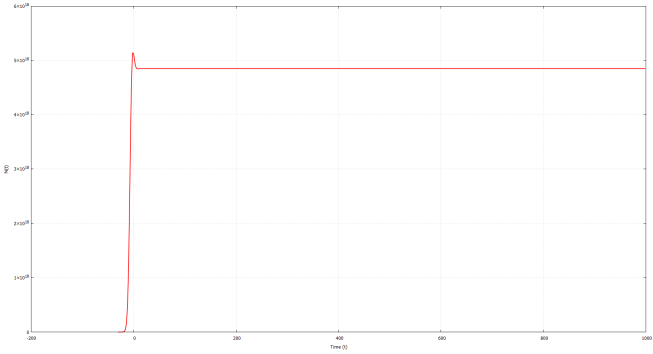
Hàm mật độ toàn phần của electron trên dải dẫn phản ánh tổng số lượng các hạt electron được bơm lên dải dẫn tại thời điểm t . Vì ở bài toán này, ta không xét đến số hạng tương tác cho hàm phân bố electron nên hàm mật độ toàn phần được kỳ vọng sẽ là một hằng số sau khi kết thúc quá trình bơm (sau khi xung đi qua). Với các cường độ xung khác nhau sẽ dẫn đến mật độ các hạt electron tồn tại trên dải dẫn tại thời điểm t có sự chênh lệch rất lớn. Tuy nhiên vẫn đảm bảo một tính chất quan trọng rằng, hàm mật độ toàn phần là một hằng số sau khi xung đi qua được thể hiện rất rõ ở hình 6.

Ngoài ra, khi xét đến cường độ xung cao hơn $\chi_0 = 2$. Một hiện tượng rất thú vị đã xảy ra

Dựa theo hình sẽ hơi khó thấy nhưng nếu để ý kỹ hàm mật độ toàn phần với xung $\chi_0 = 2$ khi xung bắt đầu bơm nó có dáng điệu lên rồi xuống xong lại lên trở lại cuối cùng bằng hằng số khi xung đi qua. Hiện tượng độc đáo này chính là cơ chế của laser với tên gọi là sự đảo nghịch



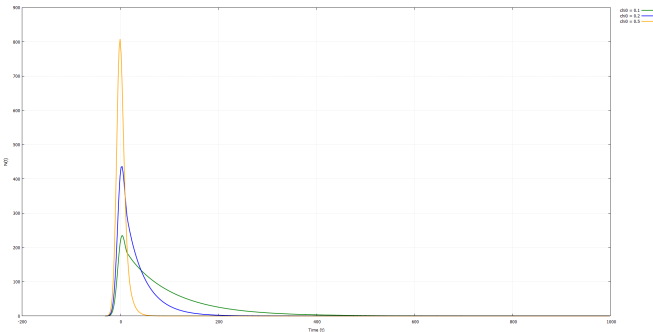
Hình 6. Hàm mật độ toàn phần với bề rộng xung $\delta_t = 10 \text{ fs}$ và năng lượng trội photon $\Delta_0 = 20 \text{ meV}$ với các cường độ xung χ_0 khác nhau.



Hình 7. Hàm mật độ toàn phần với bề rộng xung $\delta_t = 10 \text{ fs}$ và năng lượng trội photon $\Delta_0 = 20 \text{ meV}$ với cường độ xung $\chi_0 = 2$.

quần thể trong laser (laser inversion) và hiện tượng này chỉ xảy ra khi cường độ xung cao $\chi_0 = 1, 2, \dots$ trở lên.

Tiếp theo, ta đã thấy được từ hình 6 rằng khi cường độ xung càng lớn đồng nghĩa với việc mật độ hạt electron trên dải dẫn càng cao. Nhưng thể tích là có giới hạn do đó vì "đông đúc" này dẫn đến việc các hạt electron va chạm với nhau dẫn đến hàm tổng phân cực tắt dần như hình 8



Hình 8. Hàm tổng phân cực với bề rộng xung $\delta_t = 10 \text{ fs}$ và năng lượng trội photon $\Delta_0 = 20 \text{ meV}$ với cường độ xung χ_0 khác nhau.

Có thể thấy, hình 8 diễn tả gần như chính xác sự tắt dần

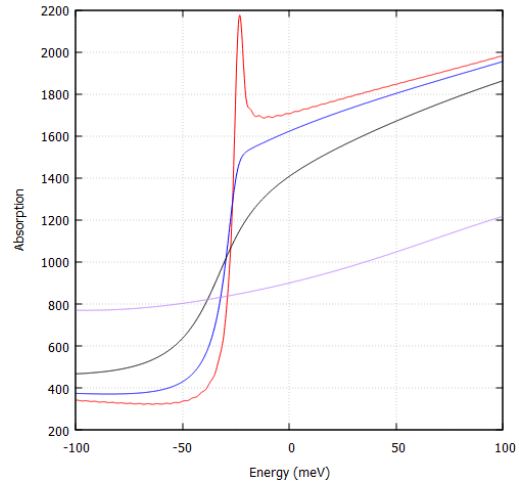
này khi với cường độ xung $\chi_0 = 0.1$ sẽ có mật độ toàn phần bé nhất dẫn đến thời gian tắt dần sẽ chậm nhất và cường độ xung $\chi_0 = 0.5$ có mật độ toàn phần lớn nhất do đó thời gian tắt dần sẽ nhanh nhất.

C. Phổ Hấp Thụ

Cuối cùng, một đại lượng vô cùng quan trọng cần được quan tâm đến chính là phổ hấp thụ $\alpha(\omega)$ với dáng điệu được xác định bởi

$$\alpha(\omega) \propto \text{Im} \left[\frac{P(\omega)}{E(\omega)} \right], \quad (\text{III.5})$$

trong đó $E(\omega)$ và $P(\omega)$ được xác định bằng cách thực hiện phép biến đổi Fourier của trường laser kích thích trong phương trình (II.9) và tổng hàm phân cực ở phương trình (III.4).



Hình 9. Phổ hấp thụ với khoảng chia năng lượng $N = 1000$, bề rộng xung $\delta_t = 10 \text{ fs}$ và năng lượng trội photon $\Delta_0 = 20 \text{ meV}$ theo các cường độ xung khác nhau.

Có thể thấy được tại cường độ xung $\chi_0 = 0.001$ và $\chi_0 = 0.1$ có xuất hiện đỉnh tại năng lượng $\Delta_0 + E_R = 24.2 \text{ meV}$ với $E_R = 4.2 \text{ meV}$. Nếu tăng khoảng chia năng lượng lên đến một mức nhất định thì đỉnh sẽ xuất hiện ngay tại vị trí năng lượng $E_R = 4.2 \text{ meV}$ là năng lượng liên kết của chất ta xét đến ở đây là GaAs. Đỉnh này ứng với vị trí của exciton (bắt cặp giữa electron và lỗ trống). Tuy nhiên việc bắt cặp này có thể bị phá vỡ khi cường độ xung lớn, theo hình 9 tại cường độ xung $\chi_0 = 0.2$ gần như đã không còn sự xuất hiện của đỉnh. Điều này là vì khi cường độ xung lớn dẫn đến mật độ electron trên dải dẫn càng lớn dẫn đến việc các hạt electron va chạm với nhau. Thêm vào đó, ngoài cơ chế hấp thụ thì còn có cơ chế "gain" khi cường độ xung lớn, ở hình 9 với mức cường độ xung $\chi_0 = 0.5$ ta thấy ở chỗ năng lượng lẽ ra xuất hiện đỉnh thì lại không có, thay vào đó đồ thị lại có dáng điệu lõm xuống. Hiện tượng này cũng chính là cơ chế của laser.

IV. KẾT LUẬN

Chúng tôi đã sử dụng gần đúng thời gian khử pha để mô phỏng động lực học của hệ bán dẫn dưới tác dụng của kích thích quang học bằng phương pháp RK4. Việc sử dụng gần đúng thời gian khử pha đã góp phần làm đơn giản hóa mô hình, giúp giải thích định lượng các hiện tượng khử pha ngắn hạn với độ chính xác cao. Các kết quả nghiên cứu đã làm rõ một số đặc điểm quan trọng.

- Thứ nhất, hàm phân bố electron và hàm phân cực phản ánh tính coherence của xung laser thông qua hình dạng Gauss.
- Thứ hai, hiện tượng đảo nghịch quần thể (laser inversion) quan sát được ở cường độ xung cao ($\chi_0 \geq 2$), mở ra tiềm năng ứng dụng trong các thiết bị laser bán dẫn.
- Cuối cùng, phổ hấp thụ xác định rõ vị trí đỉnh exciton và sự biến mất của đỉnh này tại cường độ xung lớn, giải thích các cơ chế phi tuyến như sự va chạm giữa các electron.

Tuy nhiên, gần đúng thời gian khử pha vẫn có những hạn chế đáng kể, như việc bỏ qua các tương tác phi tuyến phức tạp. Điều này dẫn đến khả năng mô hình không phản ánh đầy đủ động lực học của hệ trong điều kiện thời gian dài hoặc cường độ kích thích mạnh. Trong tương lai, việc mở rộng nghiên cứu để tích hợp các hiệu ứng phi tuyến (như trộn bốn sóng, hồi âm photon) và các tương tác phức tạp hơn (như tương tác exciton-exciton, tương tác với phonon) sẽ giúp cải thiện độ chính xác và mở rộng khả năng ứng dụng của mô hình. Ngoài ra, việc áp dụng các phương pháp giải tiên tiến hoặc gần đúng chính xác hơn cũng là một hướng đi triển vọng để hiểu rõ hơn động lực học quang học trong hệ bán dẫn. Những kết quả này góp phần quan trọng vào việc phát triển các thiết bị quang điện tử tiên tiến trong tương lai.

Phụ lục A: Chuyển từ không gian vector sóng \mathbf{k} sang không gian năng lượng

Để chuyển hệ phương trình (II.13) từ không gian vector sóng \mathbf{k} sang không gian năng lượng như hệ phương trình (II.14) ta thực hiện lần lượt:

Đổi tổng theo xung lượng như sau

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{q}} &= V_{\mathbf{q}} f_{j,\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) = \frac{4\pi e^2}{V\varepsilon_0} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q^2} f_{j,\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) \\ &= \frac{4\pi e^2}{V\varepsilon_0} \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)^2} f_{j,\mathbf{k}_1}(t) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Đổi tổng thành tích phân

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

Sử dụng tọa độ cầu

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{f_{j,\mathbf{k}_1}(t)}{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)^2} d\mathbf{k}_1 = \frac{V}{(2\pi)^2} \int \frac{k_1}{k} \ln \left| \frac{k + k_1}{k - k_1} \right| f_{j,k_1}(t) dk_1 \quad (\text{A.3})$$

Thực hiện đổi biến $k_1^2 = u_1$, ta thu được:

$$\frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0} \int_0^\infty du_1 \frac{1}{\sqrt{u}} \ln \left| \frac{\sqrt{u} + \sqrt{u_1}}{\sqrt{u} - \sqrt{u_1}} \right| f_{j,u_1}(t) \quad (\text{A.4})$$

Chuyển biến lấy tích phân thành năng lượng. Ta đặt biến như sau $\varepsilon_1 \equiv \varepsilon_{k_1} = E_R a_0^2 u_1$, $\varepsilon \equiv \varepsilon_k = E_R a_0^2 u$. Do đó tích phân ở phương trình (A.4) trở thành

$$\begin{aligned} &\frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \int_0^\infty d\varepsilon_1 \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \ln \left| \frac{\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon_1}}{\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon_1}} \right| f_{j,\varepsilon_1}(t) \\ &= \frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \int_0^\infty d\varepsilon_1 g(\varepsilon, \varepsilon_1) f_{j,\varepsilon_1}(t) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Tương tự như vậy, có thể dẫn ra

$$\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} p_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) \rightarrow \frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \int_0^\infty d\varepsilon_1 g(\varepsilon, \varepsilon_1) p_{\varepsilon_1}(t) \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} &e_{e,\mathbf{k}} + e_{h,\mathbf{k}} \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} - \Delta_0 - \frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \int_0^\infty d\varepsilon_1 g(\varepsilon, \varepsilon_1) [f_{e,\varepsilon_1} + f_{h,\varepsilon_1}] \\ &= \varepsilon - \Delta_0 - \frac{\sqrt{E_R}}{\pi} \int_0^\infty d\varepsilon_1 g(\varepsilon, \varepsilon_1) [f_{e,\varepsilon_1} + f_{h,\varepsilon_1}] \\ &\equiv \varepsilon - \Delta_0 - E_\varepsilon \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Phụ lục B: Hệ số C_0 trong công thức mật độ toàn phần

Ta có:

$$N(t) = 2 \sum_k f_{e,k}(t)$$

Đổi tổng thành tích phân:

$$N(t) = 2 \sum_k f_{e,k}(t) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int f_{e,k}(t) d^3k \quad (\text{B.1})$$

$$= \frac{8\pi V}{8\pi^2} \int_0^\infty f_{e,k} k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} \int_0^\infty f_{e,k} k^2 dk \quad (\text{B.2})$$

Đồng thời ta có: $\varepsilon = E_R a_0^2 k^2 \rightarrow k = \sqrt{\frac{\varepsilon}{E_R a_0^2}}$

Thực hiện đổi biến, ta được:

$$d\varepsilon = E_R a_0^2 2k dk \rightarrow k dk = \frac{d\varepsilon}{2E_R a_0^2} \quad (\text{B.3})$$

Do đó, tích phân trở thành:

$$\begin{aligned}
 N(t) &= \frac{V}{\pi^2} \int_0^\infty f_{e,\epsilon} \sqrt{\frac{\epsilon}{E_R a_0^2}} \frac{1}{2E_R a_0^2} d\epsilon \\
 &= \frac{V}{2\pi^2} \int_0^\infty f_{e,\epsilon} \frac{\sqrt{\epsilon}}{E_R^{3/2} a_0^3} d\epsilon
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

-
- [1] H. Haug and S.W.Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Processes of Semiconductors* (World Scientific Publishing, 2004).
 - [2] H. Haug and A.P.Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Springer, 2008).
 - [3] M.Kira and S.W.Koch, *Semiconductor Quantum Optics* (Cambridge University Press, 2011).
 - [4] W.Schäfer and M.Wegener, *Semiconductor Optics and Transport Phenomena* (Springer, 2002).
 - [5] C.F.Klingshirn, *Semiconductors Optics* (Springer, 2007).
 - [6] U.Rossler, C.Tejedor, and L.Vina, Semiconductor bloch equations including spin and polarization degrees of freedom (2002).
 - [7] J.Wilhelm, P.Grössing, A.Seith, J.Crewse, M.Nitsch, L.Weigl, C.Schmid, and F.Evers, Phys. Rev. B 103, 125419 (2021).
 - [8] M. Lindberg and S. W. Koch, Phys. Rev. B 38, 3342 (1988).
 - [9] C. Ning, R. Indik, and J. Moloney, Effective bloch equations for semiconductor lasers and amplifiers, IEEE Journal of Quantum Electronics **33**, 1543 (1997).
 - [10] E. B. Davies and L. Parns, Effective bloch equations for semiconductors, Q. J. Mech. Appl. Math. **51**, 477 (1988).
 - [11] C. Bowden and G. Agrawal, Phys. Rev. A 51, 4132 (1995).