PHƯƠNG PHÁP ĐẠI SỐ CHO BÀI TOÁN EXCITON ÂM TRONG BÁN DẪN HAI CHIỀU

HOÀNG ĐỖ NGỌC TRẦM[*], LÊ QUÝ GIANG[**],
NGUYỄN THỊ MẬN[***], LÊ VĂN HOÀNG[****]

TÓM TẮT

Phương pháp đại số được xây dựng cho bài toán exciton âm hai chiều. Hamiltonian của hệ được biểu diễn qua các toán tử sinh hủy dưới dạng chuẩn, thuận tiện cho việc tính toán. Bộ hàm cơ sở được xây dựng dưới dạng đại số cho phép tính tất cả các yếu tố ma trận cần thiết. Kết quả này là bước chuẩn bị quan trọng để áp dụng phương pháp toán tử FK giải phương trình Schrödinger cho exciton âm hai chiều trong công trình tiếp theo.

Từ khóa: phương pháp đại số, phương trình Schödinger, exciton âm, bán dẫn hai chiều.

ABSTRACT

Algebraic method for the problem of a negatively charged exciton in two-dimensional semiconductors

The algebraic method is developed for the problem of a negatively charged exciton in two-dimensional semiconductors. The Hamiltonian is represented algebraically in the standard form of the annihilation thus being advantageous for calculation. The basis set of wavefunctions is developed in the algebraic form that allows calculating all needed matrix elements. This result is an important preparation step before applying the FK operator method to solve the Schrödinger equation of the problem in the next study.

Keywords: algebraic method, Schrödinger equation, negatively charged exciton, two dimensional semiconductors.

1. Mở đầu

Khái niệm exciton, trạng thái liên kết giữa điện tử và lỗ trống trong bán dẫn, được đưa ra đầu tiên bởi Wannier vào năm 1937 [13] và cho đến nay được nghiên cứu tích cực với nhiều hiệu ứng vật lí mới [1, 10]. Năm 1958, Lampert nêu ra khả năng tồn tại các trạng thái exciton phức tạp mang điện [7], ví dụ như exciton âm là trạng thái liên kết của hai electron với một lỗ trống. Trạng thái liên kết này được quan sát thực nghiệm sau đó trong giếng lượng tử pha tạp khi sự chênh lệch mật độ giữa điện tử và lỗ trống rất lớn (xem, ví dụ, [2, 4, 12]). Exciton âm về hình thức thì giống như i-ôn âm H^- hay nguyên tử heli, tuy nhiên năng lượng liên kết nhỏ hơn nhiều do khối lượng

---

[*] ThS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM
[**] ThS
[***] ThS, Trường PTTH Mạc Đĩnh Chi
[****] PGS TSKH, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

hiệu dụng của điện tử và lỗ trống rất nhỏ. Chính vì vậy kích thước của exciton âm cũng lớn hơn rất nhiều so với kích thước của nguyên tử heli. Ngoài ra sự tương quan giữa khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống cũng khác nhiều so với sự tương quan giữa khối lượng điện tử và hạt nhân heli. Do vậy, Hamiltonian của exciton âm cũng không hoàn toàn giống của nguyên tử heli.

Hệ bán dẫn dạng nhiều lớp được quan tâm nhiều, chính vì vậy một đối tượng quan trọng được nghiên cứu lí thuyết cũng như thực nghiệm là exciton hai chiều. Lời giải phương trình Schrödinger cho hệ hai chiều được tìm thấy, ví dụ cho heli [5, 11], tuy nhiên trong các công trình đó không có sự thảo luận liên quan đến exciton âm. Bản thân phương pháp giải phương trình Schrödinger đưa trong công trình [5, 11] cũng cần được phát triển. Chúng tôi nghiên cứu phương pháp toán tử FK [3] và đã ứng dụng nó thành công cho việc tìm nghiệm chính xác cũng như giải tích của phương trình Schrödinger cho exciton hai chiều trong từ trường [6]. Việc phát triển phương pháp toán tử FK cho bài toán exciton âm hai chiều không những có ý nghĩa vật lí mà còn có tầm quan trọng về phát triển phương pháp tính toán. Để có thể sử dụng phương pháp toán tử FK, một bước quan trọng là cần xây dựng phương pháp tính toán đại số [8, 9] cho bài toán exciton âm hai chiều. Đó chính là động lực của công trình này.

2. Phương trình Schrödinger cho exciton âm hai chiều

Ta xét phương trình Schrödinger cho bài toán exciton âm hai chiều có dạng như sau:

$$\left\{-\frac{1}{2}\Delta_1-\frac{1}{2}\Delta_2-\alpha_h\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1\partial x_2}+\frac{\partial^2}{\partial y_1\partial y_2}\right)-\frac{Z}{r_1}-\frac{Z}{r_2}+\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\right\}\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=E\,\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2). \quad (1)$$

Đây là phương trình mô tả chuyển động tương đối của hai điện tử với lỗ trống. Chuyển động khối tâm của hệ gồm lỗ trống và hai điện tử được tách riêng và ta không xét ở đây. Các đại lượng $r_1=\sqrt{x_1{}^2+y_1{}^2}$, $r_2=\sqrt{x_2{}^2+y_2{}^2}$ lần lượt là khoảng cách tương đối của từng điện tử đến lỗ trống, còn $r_{12}=|\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2}|=\sqrt{(x_1-x_2)^2+(y_1-y_2)^2}$ là khoảng cách giữa hai điện tử. Ta sử dụng kí hiệu :

$$\Delta_1=\frac{\partial^2}{\partial x_1{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_1{}^2},\ \Delta_2=\frac{\partial^2}{\partial x_2{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2{}^2},\ \alpha_h=\frac{1}{1+m_h^*/m_e^*}$$

trong đó m_e^*, m_h^* là khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống trong chất bán dẫn.

Ở đây ta sử dụng hệ đơn vị nguyên tử, trong đó đơn vị độ dài và năng lượng lần lượt là bán kính Borh hiệu dụng $r_0^*=4\pi\varepsilon_0\hbar^2/\mu e^2$ và hằng số Rydberg hiệu dụng $R_y^*=\mu e^4/16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2$. Vì xét chuyển động tương đối giữa điện tử và lỗ trống cho nên khối lượng tương đối của hạt là $\mu = m_e^* m_h^* / (m_e^* + m_h^*)$. Ví dụ với hệ bán dẫn lớp GaAs/AlGaAs ta sử dụng số liệu m_e^* ; $0.067\, m_e$ và m_h^* ; $0.45\, m_e$ cho nên khối lượng hiệu dụng tương đối là μ ; $0.058\, m_e^*$, dẫn đến bán kính Borh hiệu dụng sẽ dài hơn bán kính Borh khoảng 17 lần và hằng số Rydberg hiệu dụng nhỏ đi khoảng 17 lần tương ứng. Đây không phải là khác biệt duy nhất của exciton âm so với nguyên tử heli. Ta chú ý trong phương trình (1) có thành phần:

$$\hat{J} = \alpha_h \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1 \partial y_2} \right) \tag{2}$$

được bỏ qua trong Hamiltonian của nguyên tử heli. Lí do là với heli khối lượng hạt nhân lớn hơn khối lượng điện tử nhiều lần và hệ số α_h ; 0.00025 rất nhỏ. Với trường hợp exciton âm trong hệ bán dẫn GaAs/AlGaAs khối lượng hiệu dụng của lỗ trống chỉ lớn hơn khối lượng hiệu dụng của điện tử khoảng 7 lần cho nên α_h ; 0.13 và thành phần (2) trong Hamiltonian không thể bỏ qua.

Điều đặc biệt là với thành phần (2) bài toán exciton âm vẫn có sự bảo toàn mô-men động lượng quỹ đạo. Ta sẽ giải phương trình (1) cùng với phương trình :

$$\hat{L}_z \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = m\, \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \tag{3}$$

$$\hat{L}_z = i \left(x_1 \frac{\partial}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \tag{4}$$

với *m* là số lượng tử từ có giá trị nguyên: $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$

3. Phương pháp đại số biểu diễn Hamiltonian

Phương pháp đại số sẽ được sử dụng cho các tính toán thông qua các toán tử sinh hủy được định nghĩa như sau:

$$\begin{aligned} \hat{a}_s^+ &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x_s - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_s} \right), \quad \hat{a}_s = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x_s + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_s} \right), \\ \hat{b}_s^+ &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(y_s - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial y_s} \right), \quad \hat{b}_s = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(y_s + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial y_s} \right). \end{aligned} \tag{5}$$

Ở đây, chỉ số $s = 1, 2$ và tham số ω là số thực dương, không thứ nguyên được gọi là tham số tự do [3] và có thể chọn bất kì. Tham số này có vai trò rất quan trọng trong việc giải phương trình Schrödinger bằng phương pháp toán tử FK. Các toán tử cùng loại sinh hay hủy thì giao hoán với nhau, còn các toán tử sinh và hủy thì thỏa hệ thức giao hoán sau:

$$\left[\hat{a}_s,\hat{a}_t^+\right]=\delta_{st},\quad \left[\hat{b}_s,\hat{b}_t^+\right]=\delta_{st}. \tag{6}$$

Nhằm mục đích chéo hóa toán tử mô-men động lượng quỹ đạo $\hat{L}_z$, ta định nghĩa các toán tử sinh hủy mới qua phép biến đổi chính tắc như sau :

$$\begin{aligned}
\hat{u}_s^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_s^+ + i\hat{b}_s^+\right),\quad \hat{u}_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_s - i\hat{b}_s),\\
\hat{v}_s^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_s^+ - i\hat{b}_s^+\right),\quad \hat{v}_s = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_s + i\hat{b}_s\right).
\end{aligned} \tag{7}$$

Các toán tử này thỏa mãn các hệ thức giao hoán như các toán tử (5).

Bây giờ ta sẽ biểu diễn các toán tử trong Hamiltonian của phương trình (1) về dạng các toán tử sinh, hủy (7) như sau:

$$\begin{aligned}
&\Delta_1 = -\frac{\omega}{2}(\hat{M}_1^+ - \hat{N}_1 + \hat{M}_1),\\
&\Delta_2 = -\frac{\omega}{2}(\hat{M}_2^+ - \hat{N}_2 + \hat{M}_2),\\
&x_1^2 + y_1^2 = \frac{1}{2\omega}(\hat{M}_1^+ + \hat{N}_1 + \hat{M}_1),\\
&x_2^2 + y_2^2 = \frac{1}{2\omega}(\hat{M}_2^+ + \hat{N}_2 + \hat{M}_2),\\
&(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 = \frac{1}{2\omega}(\hat{M} + \hat{M}^+ + \hat{N} - 2\hat{m}^+ - 2\hat{m} - 2\hat{n}),\\
&\frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1 \partial y_2} = \frac{1}{2\omega}(\hat{m}^+ + \hat{m} - \hat{n}).
\end{aligned} \tag{8}$$

Trong (8) ta đã sử dụng kí hiệu $\hat{M}^+ = \hat{M}_1^+ + \hat{M}_2^+$, $\hat{M} = \hat{M}_1 + \hat{M}_2$, $\hat{N} = \hat{N}_1 + \hat{N}_2$, $\hat{n} = \hat{n}_1 + \hat{n}_2$ với các toán tử mới được định nghĩa như sau:

$$\begin{aligned}
&\hat{M}_1^+ = 2\hat{u}_1^+\hat{v}_1^+,\quad \hat{M}_1 = 2\hat{u}_1\hat{v}_1,\\
&\hat{M}_2^+ = 2\hat{u}_2^+\hat{v}_2^+,\quad \hat{M}_2 = 2\hat{u}_2\hat{v}_2,\\
&\hat{N}_1 = 2\hat{u}_1^+\hat{u}_1 + 2\hat{v}_1^+\hat{v}_1 + 2,\quad \hat{N}_2 = 2\hat{u}_2^+\hat{u}_2 + 2\hat{v}_2^+\hat{v}_2 + 2,\\
&\hat{m}^+ = \hat{v}_1^+\hat{u}_2^+ + \hat{u}_1^+\hat{v}_2^+,\ \hat{m} = \hat{v}_1\hat{u}_2 + \hat{u}_1\hat{v}_2,\\
&\hat{n}_1 = \hat{u}_2^+\hat{u}_1 + \hat{v}_2^+\hat{v}_1,\ \hat{n}_2 = \hat{u}_1^+\hat{u}_2 + \hat{v}_1^+\hat{v}_2.
\end{aligned} \tag{9}$$

Toán tử mô-men động lượng quỹ đạo có dạng:

$$\hat{L}_z = \hat{u}_1^+\hat{u}_1 - \hat{v}_1^+\hat{v}_1 + \hat{u}_2^+\hat{u}_2 - \hat{v}_2^+\hat{v}_2 \qquad (10)$$

là toán tử trung hòa và giao hoán với tất cả các toán tử (9).

Một điểm quan trọng là các toán tử (9) tạo thành các đại số kín với các hệ thức giao hoán sau:

$$\begin{aligned}
&\left[\hat{M}_1, \hat{N}_1\right] = 4\hat{M}_1, \ \left[\hat{M}_1, \hat{M}_1^+\right] = 2\hat{N}_1, \ \left[\hat{N}_1, \hat{M}_1^{\ +}\right] = 4\hat{M}_1^{\ +},\\
&\left[\hat{M}_2, \hat{N}_2\right] = 4\hat{M}_2, \ \left[\hat{M}_2, \hat{M}_2^+\right] = 2\hat{N}_2, \ \left[\hat{N}_2, \hat{M}_2^{\ +}\right] = 4\hat{M}_2^{\ +},\\
&\left[\hat{m}, \hat{m}^+\right] = \frac{1}{2}(\hat{N}_1 + \hat{N}_2), \ \left[\hat{n}_1, \hat{n}_2\right] = -\frac{1}{2}(\hat{N}_1 - \hat{N}_2),\\
&\left[\hat{N}_1, \hat{m}^+\right] = 2\hat{m}^+, \ \left[\hat{N}_1, \hat{m}^+\right] = 2\hat{m}^+, \ \left[\hat{m}, \hat{N}_1\right] = 2\hat{m}, \ \left[\hat{m}, \hat{N}_2\right] = 2\hat{m},\\
&\left[\hat{m}, \hat{n}_1\right] = \hat{M}_1, \ \left[\hat{m}, \hat{n}_2\right] = \hat{M}_2, \ \left[\hat{n}_1, \hat{m}^+\right] = \hat{M}_2^+, \ \left[\hat{n}_2, \hat{m}^+\right] = \hat{M}_1^+,\\
&\left[\hat{M}_1, \hat{n}_1\right] = 0, \ \left[\hat{M}_2, \hat{n}_1\right] = 2\hat{m}, \ \left[\hat{M}_1, \hat{n}_2\right] = 2\hat{m}, \ \left[\hat{M}_2, \hat{n}_2\right] = 0,\\
&\left[\hat{n}_2, \hat{M}_1^+\right] = 0, \ \left[\hat{n}_2, \hat{M}_2^+\right] = 2\hat{m}^+, \ \left[\hat{n}_1, \hat{M}_1^+\right] = 2\hat{m}^+, \ \left[\hat{n}_1, \hat{M}_2^+\right] = 0,\\
&\left[\hat{m}, \hat{M}_1^+\right] = 2\hat{n}_2, \ \left[\hat{m}, \hat{M}_2^+\right] = 2\hat{n}_1, \ \left[\hat{M}_1, \hat{m}^+\right] = 2\hat{n}_1, \ \left[\hat{M}_2, \hat{m}^+\right] = 2\hat{n}_2,\\
&\left[\hat{N}_1, \hat{n}_1\right] = -2\hat{n}_1, \ \left[\hat{N}_2, \hat{n}_1\right] = 2\hat{n}_1, \ \left[\hat{N}_2, \hat{n}_2\right] = -2\hat{n}_2, \ \left[\hat{N}_1, \hat{n}_2\right] = 2\hat{n}_2.
\end{aligned} \qquad (11)$$

Ngoài các giao hoán tử (11) ta cần lưu ý các giao hoán tử khác đều bằng không. Cụ thể, ngoại trừ các toán tử $\hat{n}_1, \hat{n}_2$ và $\hat{N}_1, \hat{N}_2$, các toán tử còn lại với dấu (+) là toán tử sinh, và không có dấu này gọi là toán tử hủy. Các toán tử sinh giao hoán với các toán tử sinh, các toán tử hủy giao hoán với các toán tử hủy. Ngoài ra, các toán tử khác chỉ số (1 hoặc 2) giao hoán với nhau, ngoại trừ hai toán tử $\hat{n}_1, \hat{n}_2$.

Việc xây dựng được đại số kín (11) và biểu diễn được Hamiltonian của hệ qua các toán tử (9) rất quan trọng trong việc tính toán sử dụng phương pháp đại số. Ví dụ các toán tử tương tác Coulomb trong Hamiltonian có thể đưa về dạng chuẩn theo nghĩa là các toán tử sinh sang bên trái, và toán tử hủy sang bên phải. Ta thu được :

$$\hat{V}_1 = \frac{Z}{r_1} = -\frac{\sqrt{2\omega}Z}{\sqrt{\pi}}\int_0^{+\infty} dt\frac{1}{\sqrt{t}}\exp\left(-\frac{t}{1+2t}\hat{M}_1^+\right)$$
$$\times\exp\left(-\hat{N}_1\ln\sqrt{1+2t}\right)\exp\left(-\frac{t}{1+2t}\hat{M}_1\right),$$
$$\hat{V}_2 = \frac{Z}{r_2} = -\frac{\sqrt{2\omega}Z}{\sqrt{\pi}}\int_0^{+\infty} dt\frac{1}{\sqrt{t}}\exp\left(-\frac{t}{1+2t}\hat{M}_2^+\right)$$
$$\times\exp\left(-\ln\sqrt{1+2t}\,\hat{N}_2\right)\exp\left(-\frac{t}{1+2t}\hat{M}_2\right),$$
$$\hat{V}_{12} = \frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} = \frac{\sqrt{2\omega}}{\sqrt{\pi}}\int_0^{+\infty}\frac{dt}{\sqrt{t}}\exp\left(-\frac{t}{1+4t}\hat{M}^+\right)\exp\left(\frac{2t}{1+4t}\hat{m}^+\right)$$
$$\times\exp\left(-\frac{1}{2}\ln\sqrt{1+4t}\;\hat{N}\right)\exp\left(\ln\sqrt{1+4t}\;\hat{n}\right) \tag{12}$$
$$\times\exp\left(-\frac{t}{1+4t}\hat{M}\right)\exp\left(\frac{2t}{1+4t}\hat{m}\right).$$

Để có được toán tử tương tác Coulomb dạng chuẩn như trong các công thức (12), trước tiên ta đã sử dụng phép biến đổi Laplace để đưa tọa độ dưới mẫu về dạng hàm mũ. Sau đó sử dụng các giao hoán tử (11) và một quy trình biến đổi như trình bày trong công trình [8] để thu được (12).

4. Bộ hàm cơ sở và tính toán yếu tố ma trận

Bây giờ ta xây dựng bộ hàm cơ sở dưới dạng đại số. Ta xuất phát từ nghiệm riêng của các toán tử trung hòa $\hat{u}_1^+\hat{u}_1$, $\hat{u}_2^+\hat{u}_2$, $\hat{v}_1^+\hat{v}_1$, $\hat{v}_2^+\hat{v}_2$, dễ dàng xây dựng như sau:

$$|\,j_1 j_2 j_3 j_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{j_1!\,j_2!\,j_3!\,j_4!}}(\hat{u}_1^+)^{j_1}(\hat{v}_1^+)^{j_2}\hat{u}_2^{+\,j_3}(\hat{v}_2^+)^{j_4}\left|0(\omega)\right\rangle \tag{13}$$

với j_1, j_2, j_3, j_4 là các số nguyên không âm. Trong (13), trạng thái chân không $|0(\omega)\rangle$ là nghiệm của các phương trình:

$$\hat{u}_1|0(\omega)\rangle = 0,\quad \hat{u}_2|0(\omega)\rangle = 0,\qquad \hat{v}_1|0(\omega)\rangle = 0,\quad \hat{v}_2|0(\omega)\rangle = 0 \tag{14}$$

với điều kiện chuẩn hóa $\langle 0(\omega)|0(\omega)\rangle = 1$.

Đối với bài toán đang xét, có bảo toàn mô-men động lượng quỹ đạo nên bộ hàm sóng cơ sở cần tìm cũng là bộ hàm riêng của toán tử $\hat{L}_z$. Từ (10) ta thấy toán tử này chỉ chứa các toán tử trung hòa cho nên (13) chính là hàm riêng của $\hat{L}_z$ với trị riêng $m = j_1 + j_3 - j_2 - j_4$. Ta định nghĩa số lượng tử chính $N = j_1 + j_2 + j_3 + j_4$ và thấy rằng $N = 2j_1 + 2j_3 - m = 2j_2 + 2j_4 + m$. Và vì N là số nguyên không âm nên ta suy ra dạng của nó là $N = 2n + |m|$ với $n = 0,1,2,\ldots$ là số nguyên không âm, liên quan đến các số j_1, j_2, j_3, j_4 như sau : (a) $n = j_1 + j_3$ nếu $m < 0$; (b) $n = j_2 + j_4$ nếu $m \geq 0$. Để thuận tiện ta sẽ sử dụng bốn số lượng tử n, j_1, j_2, m để đặc trưng các trạng thái ứng với các hàm trong bộ hàm cơ sở. Ta viết lại (13) như sau :

$$\left|n, j_1, j_2, m\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{j_1!\, j_2!(n+|m|-j_1)!(n-j_2)!}} (\hat{u}_1^+)^{j_1} (\hat{v}_1^+)^{j_2} (\hat{u}_2^+)^{n+|m|-j_1} (\hat{v}_2^+)^{n-j_2} \left|0(\omega)\right\rangle \quad (15)$$

cho trường hợp $m \geq 0$, và

$$\left|n, j_1, j_2, m\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{j_1!\, j_2!(n-j_1)!(n+|m|-j_2)!}} (\hat{u}_1^+)^{j_1} (\hat{v}_1^+)^{j_2} (\hat{u}_2^+)^{n-j_1} (\hat{v}_2^+)^{n+|m|-j_2} \left|0(\omega)\right\rangle \quad (16)$$

cho trường hợp $m < 0$. Trong đó n là số nguyên không âm bất kì; m là số nguyên bất kì; j_1, j_2 là hai số nguyên không âm thỏa mãn các điều kiện: $n + |m| \geq j_1 \geq 0$ và $n \geq j_2 \geq 0$ trong trường hợp $m \geq 0$; hoặc $n \geq j_1 \geq 0,\quad n + |m| \geq j_2 \geq 0$ trong trường hợp $m < 0$.

Ta xét trường hợp riêng khi $m = 0$. Chú ý là phương trình Schrödinger (1) chỉ chứa các toán tử đưa ra trong (9) cho nên ta có thể xây dựng bộ hàm cơ sở mới là tổ hợp của bộ cơ sở (15)-(16) sao cho nó có dạng như sau:

$$\left|n, j_1, j_2\right\rangle = (\hat{M}_1^+)^{j_1} (\hat{M}_2^+)^{j_2} (m^+)^{n-j_1-j_2} \left|0(\omega)\right\rangle. \quad (17)$$

Bộ hàm cơ sở mới (17) về nguyên tắc cũng làm việc như bộ hàm cơ sở (15)-(16), tuy nhiên nó sẽ giúp tiết kiệm nguồn tài nguyên tính toán nhiều lần.

Các yếu tố ma trận của Hamiltonian có thể tính toán bằng phương pháp đại số dựa vào các giao hoán tử (6) cho bộ hàm cơ sở (15)-(16) và dựa vào các giao hoán tử (11) cho bộ hàm cơ sở (17). Trong phạm vi bài báo này chúng tôi đưa ra các công thức cơ bản để tính các yếu tố ma trận theo bộ hàm cơ sở (17) như sau:

$$\begin{aligned}
&\hat{N}_1 \left|n, j_1, j_2\right\rangle = 2(n + j_1 - j_2 + 1)\left|n, j_1, j_2\right\rangle, \\
&\hat{N}_2 \left|n, j_1, j_2\right\rangle = 2(n - j_1 + j_2 + 1)\left|n, j_1, j_2\right\rangle, \\
&\hat{n}_1 \left|n, j_1, j_2\right\rangle = (n - j_1 - j_2)\left|n, j_1, j_2 + 1\right\rangle + 2j_1\left|n, j_1 - 1, j_2\right\rangle, \\
&\hat{n}_2 \left|n, j_1, j_2\right\rangle = (n - j_1 - j_2)\left|n, j_1 + 1, j_2\right\rangle + 2j_2\left|n, j_1, j_2 - 1\right\rangle,
\end{aligned} \quad (18)$$

$$\hat{M}_1 \left| n, j_1, j_2 \right\rangle = 4 j_1 (n - j_2) \left| n-1, j_1 - 1, j_2 \right\rangle$$
$$+ (n - j_1 - j_2)(n - j_1 - j_2 - 1) \left| n-1, j_1, j_2 + 1 \right\rangle,$$
$$\hat{M}_2 \left| n, j_1, j_2 \right\rangle = 4 j_2 (n - j_1) \left| n-1, j_1, j_2 - 1 \right\rangle$$
$$+ (n - j_1 - j_2)(n - j_1 - j_2 - 1) \left| n-1, j_1 + 1, j_2 \right\rangle,$$
$$\hat{m} \left| n, j_1, j_2 \right\rangle = (n + j_1 + j_2 + 1)(n - j_1 - j_2) \left| n-1, j_1, j_2 \right\rangle$$
$$+ 4 j_1 j_2 \left| n-1, j_1 - 1, j_2 - 1 \right\rangle.$$

5. Kết luận

Như vậy ta đã xây dựng thành công một đại số kín bao gồm các toán tử bậc hai của các toán tử sinh hủy và biểu diễn được Hamiltonian của exciton âm hai chiều qua các toán tử này. Kết quả này cho phép ứng dụng tính toán thuần đại số khi giải phương trình Schrödinger cho bài toán đang xét bằng phương pháp toán tử FK. Bộ hàm cơ sở cũng được xây dựng qua biểu diễn đại số và các công thức cần thiết được đưa ra cho việc tính các yếu tố ma trận ứng với bộ hàm cơ sở này. Trong công trình tiếp theo chúng tôi sẽ vận dụng phương pháp toán tử FK để tìm nghiệm số chính xác cho phương trình Schrödinger cho exciton âm hai chiều. Chú ý là trong công trình này Hamiltonian của exciton âm hai chiều được đưa ra với điều kiện khối lượng điện tử không thể bỏ qua so với khối lượng lỗ trống.

Ghi chú: *Công trình này được thực hiện trong phạm vi đề tài tài trợ bởi Quỹ phát triển khoa học và công nghệ quốc gia (NAFOSTED), mã số 103.01.2011.08. Tác giả Hoàng Đỗ Ngọc Trầm cám ơn sự tài trợ của đề tài cấp cơ sở Trường Đại học Sư phạm TPHCM.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Ashkinadze B., Linker E., Cohen E., Dzyubenko A., and Feiffer L. (2004), "Photoluminescence of a two dimensional electron gas in a modulation-doped $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum well at filling factors $\nu < 1$", *Phys. Rev. B* **69,** 115303-7

2. Astakhov G. V., Yakolev D. R., Rudenkov V. V., Christianen P. C. H., Barrick T., Gooker S. A., Dzyubenko A. B., Ossau W., Maan J. C., Karczewshi G., Wojtowicz T. (2005), "Definitive observation of the dark triplet ground state of charged exciton in high magnetic fields", *Phys. Rev. B* **71,** 201312-4 (R)

3. Feranchuk I. D., Komarov L. I., Nichipor I. V., Ulyanenkov A. P. (1995), "Operator Method in the problem of Quantum Anharmonic Oscillator", *Ann. Phys.* **238,** 370-440

4. Finkelstein G., Shtrikman H., and Bar-Joseph I. (1996), "Negatively and positively charged excitons in $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum wells", *Phys. Rev. B* **53,** R1709-R1712
5. Hilico L., Gremaud B., Jonckheere T., Billy N., and Delande D. (2002), "Quantum three-body Coulomb problem in two dimensions", *Phys. Rev. A* **66,** 022101-4
6. Hoang-Do Ngoc-Tram, Pham Dang-Lan and Le Van-Hoang, "Exact numerical solutions of the Schrödinger equation for a two-dimensional exciton in a homogeneous magnetic field of arbitrary strength", *Physica E* (submitted)
7. Lampert M. A. (1958), "Mobile and immobile effective-mass-particle complexes in nonmetallic solids", *Phys. Rev. Lett.* **1,** 450-453
8. Le Van-Hoang (2004), "Algebraic method with the use of many-particle Coulomb Green function for atomic calculations", in book "*Etude on Theor. Phys.*", World Scientific, Singapore, pp. 231-249
9. Le Van-Hoang and Nguyen Thu-Giang (1993), "The algebraic methods in two-dimensional quantum systems", *J. Phys. A* **26,** 1409-1418
10. Nichel H. A., Yeo T. M., Dzyubenko A. B., Mcombe B. D., Petrou A., Sivachenko A. Yu, Schaff W., Umansky V. (2002), "Internal transitions of negative charged magneto excitons and many body effects in a two-dimensional electron gas", *Phys. Rev. Lett.* **88,** 056801-4
11. Patil S. H. (2008), "The helium atom and isoelectronic ions in two dimensions", *Eur. J. Phys.* **29,** 517–525.
12. Solovyev V. and Kukushkin I. (2009), "Measurement of binding energy of negatively charged excitons in $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ quantum wells", *Phys. Rev. B* **7,** 233306-4
13. Wannier G. H. (1937), "The Structure of electronic levels in insulating crytals", *Phys. Rev.* **52**, 191-197

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 07-01-2013; ngày phản biện đánh giá: 17-01-2013; ngày chấp nhận đăng: 18-02-2013)