



PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ FK CẢI TIẾN GIẢI PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER CHO EXCITON HAI CHIỀU TRONG TỪ TRƯỜNG ĐỀU

Nguyễn Hồ Thanh Huyền¹, Hoàng Đỗ Ngọc Trâm^{2*}

¹ Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐHQG TP HCM

² Khoa Vật lý - Trường Đại học Sư phạm TP Hồ Chí Minh

Ngày Tòa soạn nhận được bài: 16-9-2016; ngày phân biện đánh giá: 10-10-2016; ngày chấp nhận đăng: 24-3-2017

TÓM TẮT

Phương pháp toán tử FK với phép biến đổi Laplace được áp dụng để tìm lại nghiệm số cho bài toán exciton hai chiều trong từ trường đều nhằm thay thế phép biến đổi Levi-Civita trong vùng từ trường lớn và phát triển cho các hệ phức tạp. Kết quả thu được nghiệm số với độ chính xác tám chữ số thập phân cho các trạng thái có chỉ số lượng tử đến hàng trăm. Độ chính xác này giảm khi từ trường nhỏ và đối với trạng thái có số lượng tử từ $m = 0$. Như vậy, phép biến đổi Laplace không thay thế được hoàn toàn cho phép biến đổi Levi-Civita khi xác định nghiệm số, nhưng vẫn có ý nghĩa cho phân tích giải tích và thuận lợi để phát triển cho những hệ phức tạp.

Từ khóa: exciton hai chiều, nghiệm số, phương pháp toán tử, phương trình Schrödinger, từ trường.

ABSTRACT

The modified FK operator method for solving the Schrödinger equation of two-dimensional exciton in a uniform magnetic field of arbitrary strength

FK Operator Method combined with Laplace transformation is used to retrieve numerical solutions of the problem of 2D exciton in a uniform magnetic field (MF) in order to replace the Levi-Civita transformation in the case of high MF. Numerical solutions with precision of eight decimal places are found for states with quantum number up to hundreds. This precision decreases for states with the magnetic quantum number $m=0$ and in weak MF. Therefore, the Laplace transformation can not be replaced entirely for the Levi-Civita one to get numerical solutions but it is meaningful for analytical analysis and for complex systems.

Keywords: laplacetransformation, numerical solution, operator method, Schrödinger equation, two-dimensional exciton.

* Email: tramhcn@hcmup.edu.vn

1. Mở đầu

Exciton là trạng thái liên kết giữa điện tử và lỗ trống trong các tinh thể bán dẫn, đây là đối tượng nghiên cứu quan trọng trong các nghiên cứu cơ bản và các ứng dụng trong quang điện tử [1]. Đặc biệt, trong các hệ bán dẫn hai chiều đang rất được quan tâm như TMDs (Transition Metal Dichalcogenides), việc hình thành exciton chính là hình thức chuyển dời quang học chủ yếu [2]. Việc tìm phổ năng lượng của exciton là một trong các hướng nghiên cứu được quan tâm do phổ hấp thụ của exciton có cấu trúc rõ nét, cho phép thực hiện các phân tích chi tiết về mặt lý thuyết. Tuy nhiên, năng lượng của các trạng thái kích thích của exciton rất khó đo được trong thực nghiệm [3]. Vì vậy, người ta thường sử dụng trường ngoài trong các nghiên cứu về đo đặc phổ năng lượng của exciton, đặc biệt là từ trường. Đối với các hệ exciton, việc áp dụng từ trường vào hệ sẽ giam hãm exciton, làm tăng cường độ dao động và khối lượng hiệu dụng của exciton... Do đó, năng lượng liên kết của các exciton cũng được tăng lên [4], phổ năng lượng ứng với các trạng thái kích thích của các exciton rõ nét hơn. Vì vậy, việc tìm phổ năng lượng của exciton trong từ trường giúp ta có thể nghiên cứu và giải thích một số hiệu ứng vật lý cũng như hiểu thêm về các tính chất quang của hệ bán dẫn dưới sự tác dụng của từ trường.

Việc giải phương trình Schrödinger để tìm phổ năng lượng và các hàm riêng của exciton hai chiều trong từ trường được nhiều nhóm nghiên cứu quan tâm [5-8]. Phương pháp toán tử FK (FK-OM) [9] đã được áp dụng để giải bài toán exciton trong từ trường đều với cường độ bất kỳ bằng cách kết hợp với phép biến đổi Levi-Civita. Kết quả thu được là nghiệm số chính xác (hàm sóng và năng lượng) đến 20 chữ số thập phân cho trạng thái cơ bản và các trạng thái kích thích với số lượng tử chính lên đến 150, là một kỉ lục trong hướng nghiên cứu này [5, 6]. Tuy nhiên, việc kết hợp phép biến đổi Levi-Civita với FK-OM cũng gặp một số khó khăn khi áp dụng cho bài toán. Thứ nhất, khi sử dụng FK-OM kết hợp với phép biến đổi Levi-Civita, bộ hàm sóng cơ sở là bộ hàm riêng của bài toán nguyên tử dưới tác dụng của tương tác Coulomb. Bộ hàm sóng này làm việc tốt trong trường hợp từ trường nhỏ. Trong trường hợp từ trường lớn, hiệu quả của phương pháp giảm đi, thể hiện qua sự giảm tốc độ hội tụ về nghiệm chính xác cũng như sự thu hẹp miền hội tụ được theo tham số tự do dùng hiệu chỉnh tốc độ hội tụ. Đồng thời, cũng do bộ hàm sóng cơ sở là bộ hàm Coulomb, việc sắp xếp các mức năng lượng trong miền từ trường mạnh cũng không theo trật tự. Thứ hai, việc kết hợp phép biến đổi Levi-Civita trong FK-OM là nhằm làm mất đi các biến động lực ở mẫu số. Tuy nhiên, điều này chỉ hiệu quả trong trường hợp bài toán một hạt, trong trường hợp bài toán hệ nhiều hạt, việc áp dụng phép biến đổi trở nên rất phức tạp.

Trong công trình [10] đã chỉ ra rằng FK-OM với phép biến đổi Laplace có thể thay cho phép biến đổi Levi-Civita để đưa biến động lực ra khỏi mẫu số trong các bài toán

nguyên tử. Với phép biến đổi Laplace, bộ hàm sóng cơ sở có phần đóng góp lớn của từ trường, nên được kì vọng là sẽ làm việc tốt trong miền từ trường lớn. Ngoài ra, phép biến đổi này cũng được chỉ ra là có thể mở rộng cho bài toán các hệ nhiều hạt như exciton âm [11].

Trong công trình này, chúng tôi áp dụng FK-OM kết hợp với phép biến đổi Laplace cho exciton hai chiều trong từ trường đều để tìm lại nghiệm số chính xác cho bài toán. Từ các kết quả thu được, chúng tôi đánh giá khả năng làm việc của phương pháp trong các miền từ trường khác nhau, nhất là miền từ trường lớn. Từ đó, kết luận về khả năng áp dụng của bài toán cho việc giải phương trình Schrödinger cho các hệ nguyên tử. Đây cũng là một bước trong việc hoàn chỉnh FK-OM cho các bài toán hệ nguyên tử hai chiều trong từ trường.

Cấu trúc bài báo gồm ba phần: Phần thứ nhất trình bày về phương pháp, phần thứ hai trình bày kết quả thu được và thảo luận; cuối cùng là phần kết luận và dự kiến phát triển của đề tài.

2. Phương pháp toán tử FK cho exciton hai chiều trong từ trường

Phương trình Schrödinger cho exciton hai chiều trong từ trường có dạng [5]:

$$\mathbf{H}\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (1)$$

$$\text{với } \mathbf{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{ig}{2} \frac{\partial}{\partial x} - y \frac{\partial}{\partial x} + \frac{g^2}{8} (x^2 + y^2) - \frac{Z}{r}, \quad (2)$$

trong đó đơn vị độ dài và năng lượng được định nghĩa như trong công trình [5].

Đối với phần tương tác Coulomb trong (2), chúng tôi sử dụng phép biến đổi Laplace [10] để đưa tọa độ ra khỏi mẫu số như sau:

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{\sqrt{p}} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-tr^2}}{\sqrt{t}} dt. \quad (3)$$

Trong phần này, chúng tôi áp dụng FK-OM để giải phương trình Schrödinger (1)-(3) với bốn bước cơ bản [10]:

Bước 1. Viết lại Hamiltonian trong biểu diễn đại số của các toán tử sinh hủy hai chiều:

$$\begin{aligned} \hat{a}(w) &= \sqrt{\frac{w}{2}} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{w} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} & \hat{a}^+(w) &= \sqrt{\frac{w}{2}} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{w} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{b}(w) &= \sqrt{\frac{w}{2}} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{w} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} & \hat{b}^+(w) &= \sqrt{\frac{w}{2}} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{1}{w} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} \end{aligned} \quad (4)$$

trong đó: w là tham số tự do đưa vào để tối ưu hóa quá trình tính toán; \hat{M}, \hat{N} là các toán tử hủy; \hat{M}^+, \hat{N}^+ là các toán tử sinh. Các toán tử này thỏa mãn các hệ thức giao hoán:

$$\hat{M}, \hat{M}^+ \hat{M} = 1, \quad \hat{N}, \hat{N}^+ \hat{N} = 1. \quad (5)$$

Các giao hoán tử khác sẽ bằng không.

Mặt khác, đối với hệ hai chiều, hình chiếu moment quỹ đạo lên trục z là đại lượng bảo toàn, do đó ta chọn các toán tử sinh hủy mới sao cho \hat{L}_z có dạng chéo hóa:

$$\begin{aligned} \hat{u}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ + i\hat{b}^+), & \hat{u} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} - i\hat{b}), \\ \hat{v}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ - i\hat{b}^+), & \hat{v} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + i\hat{b}). \end{aligned} \quad (6)$$

Các toán tử này cũng thỏa mãn các hệ thức giao hoán như biểu thức (5):

$$\hat{u}, \hat{u}^+ \hat{u} = \hat{v}, \hat{v}^+ \hat{v} = 1. \quad (7)$$

Khi đó toán tử hình chiếu moment động lượng quỹ đạo được viết lại như sau:

$$\hat{L}_z = \hat{u}^+ \hat{u} - \hat{v}^+ \hat{v}. \quad (8)$$

Lúc này, Hamiltonian trong biểu diễn đại số có dạng như sau:

$$\hat{H} = -\frac{w}{4}(\hat{M} + \hat{M}^+ - \hat{N}) + \frac{gm}{2} + \frac{g^2}{16w}(\hat{M} + \hat{M}^+ + \hat{M}^+) - Z \sqrt{\frac{2w}{p}} \frac{\partial}{\partial \sqrt{t}} \quad (9)$$

$$+ \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{(i!)^2} \frac{\partial^{2i}}{\partial (1+2t)^{\frac{i}{2}}} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2t)^{N/2}} \hat{M}^i + \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{i!j!} \frac{\partial^{i+j}}{\partial (1+2t)^{\frac{i+j}{2}}} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2t)^{N/2}} \hat{M}^j \frac{\partial^{i+j}}{\partial (1+2t)^{\frac{i+j}{2}}}$$

trong đó $\hat{M}^+ = 2\hat{u}^+ \hat{v}^+$, $\hat{N} = 2\hat{u}^+ \hat{u} + 2\hat{v}^+ \hat{v} + 2$ và $\hat{M} = 2\hat{u}\hat{v}$. Các toán tử này cũng tạo thành một đại số kín với các hệ thức giao hoán:

$$\hat{M}, \hat{N} \hat{M} = 4\hat{M}, \quad \hat{M}, \hat{M}^+ \hat{M} = 2\hat{N}, \quad \hat{N}, \hat{M}^+ \hat{M} = 4\hat{M}^+. \quad (10)$$

Các biểu thức giao hoán (10) chính là cơ sở cho các tính toán đại số.

Bước 2. Tách Hamilton thành hai phần: phần chính gồm các toán tử trung hòa (có số toán tử sinh và hủy bằng nhau), phần còn lại là nhiễu loạn:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{\hbar^2 w^2}{4m} + \frac{g^2}{16w\hbar} \hat{N} + \frac{gm}{2} - Z \sqrt{\frac{2w}{p}} \frac{dt}{\sqrt{t}} \hat{a} \frac{1}{(i!)^2} \frac{\hbar - t}{1+2t} \frac{\hat{O}^{2i}}{\hbar} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2t)^{\hat{N}/2}} \hat{M}^i, \\ \hat{V} &= \frac{\hbar^2 w}{4} + \frac{g^2}{16w\hbar} (\hat{M} + \hat{M}^+) - Z \sqrt{\frac{2w}{p}} \frac{dt}{\sqrt{t}} \hat{a} \hat{a} \frac{1}{i!j!} \frac{\hbar - t}{1+2t} \frac{\hat{O}^{i+j}}{\hbar} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2t)^{\hat{N}/2}} \hat{M}^j. \end{aligned} \quad (11)$$

Với cách tách như trên, ta thấy cả hai thành phần trên đều phụ thuộc tham số tự do w được đưa vào trong Bước 1. Sở dĩ tham số này gọi là tự do vì Hamiltonian toàn phần không phụ thuộc giá trị của nó. Do đó, giá trị của tham số w không làm ảnh hưởng đến nghiệm chính xác của bài toán. Mặc dù vậy, tham số này có thể hiệu chỉnh tốc độ hội tụ vì khi lựa chọn giá trị phù hợp, phần chính của Hamiltonian chiếm ưu thế so với thành phần nhiễu loạn – hay nói cách khác là nghiệm gần đúng bậc không sẽ rất gần với kết quả chính xác, vì vậy bài toán sẽ hội tụ nhanh.

Bước 3. Chọn bộ hàm sóng cơ sở là hàm riêng của phần chính và hình chiếu moment quỹ đạo lên trục z :

$$|k, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{k!(k+|m|)!}} (\hat{u}^+)^{k+|m|} (\hat{v}^+)^k |0(w)\rangle \text{ khi } m \geq 0, \quad (12)$$

$$|k, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{k!(k+|m|)!}} (\hat{u}^+)^k (\hat{v}^+)^{k+|m|} |0(w)\rangle \text{ khi } m \leq 0, \quad (13)$$

với $k = 0, 1, 2, \dots$; $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ là số lượng tử từ (trị riêng của \hat{L}_z) và trạng thái “chân không” $|0(w)\rangle$ được xác định bởi phương trình:

$$\hat{u}|0(w)\rangle = 0, \quad \hat{v}|0(w)\rangle = 0, \quad \langle 0(w)|0(w)\rangle = 1. \quad (14)$$

Khi tác dụng các toán tử $\hat{M}, \hat{N}, \hat{M}^+$ lên các hàm sóng cơ sở (12), (13), ta thu được kết quả giống nhau:

$$\begin{aligned} \hat{M}^+ |k, m\rangle &= 2\sqrt{(k+1)(k+|m|+1)} |k+1, m\rangle, \\ \hat{M} |k, m\rangle &= 2\sqrt{k(k+|m|)} |k-1, m\rangle, \\ \hat{N} |k, m\rangle &= 2(2k+|m|+1) |k, m\rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

Bước 4. Tìm nghiệm số chính xác của bài toán

Hàm sóng chính xác dưới dạng tổ hợp tuyến tính của các hàm sóng cơ sở:

$$Y_{k,m}(x) = \sum_{k=0}^{N_{\max}} C_k |k, m\rangle. \quad (16)$$

Ở đây, ta giả sử hàm sóng hội tụ về nghiệm chính xác khi $k = N_{\max}$.

Ta thay hàm sóng (16) vào phương trình (1) và thực hiện một số tính toán, ta có phương trình Schrödinger dưới dạng ma trận:

$$\mathbf{\hat{a}}_{k=1}^{N_{\max}} C_k H_{k,k} = E \mathbf{\hat{a}}_{k=1}^{N_{\max}} C_k, \tag{17}$$

hay $(H)(C) = E(C)$ (18)

với ma trận (H) có các thành phần $H_{k,k}$ và ma trận (C) có các thành phần C_1, \dots, C_k . Các trị riêng E là các nghiệm mà ta cần tìm, nghiệm này càng tiến tới giá trị chính xác khi N_{\max} càng lớn. Trong đó, các yếu tố ma trận (H) được xác định bởi:

$$H_{k,k} = \frac{gm}{2} + \frac{\mathfrak{g}g^2}{16w} + \frac{w\ddot{0}}{4\mathfrak{g}}(2k + |m| + 1) - Z\sqrt{w}\mathbf{\hat{a}}_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} \frac{k!(k + |m|)!}{(k - i)!(k + |m| - i)!} I_{2k + |m| + 1}^{2i},$$

$$H_{k,k+1} = \frac{\mathfrak{g}g^2}{16w} - \frac{w\ddot{0}}{4\mathfrak{g}}\sqrt{(k + 1)(k + |m| + 1)} - Z\sqrt{w}\mathbf{\hat{a}}_{i=1}^{k+1} \frac{1}{i!(i - 1)!} \frac{\sqrt{k!(k + |m|)!(k + 1)!(k + 1 + |m|)!}}{(k - i + 1)!(k + |m| - i + 1)!} I_{2k + |m| + 2}^{2i - 1},$$

$$H_{k+s,k}^{(s>1)} = - Z\sqrt{w}\mathbf{\hat{a}}_{i=s}^{k+s} \frac{1}{i!(i - s)!} \frac{\sqrt{k!(k + |m|)!(k + s)!(k + s + |m|)!}}{(k - i + s)!(k + |m| - i + s)!} I_{2k + s + |m| + 1}^{2i - s},$$
(19)

với $I_p^q = \frac{2^{-q}}{\sqrt{p}} \int_0^{\infty} dt \frac{(-t^2)^q}{(1+t^2)^p} = \frac{(-1)^q G(\frac{p}{2}, -q - \frac{1}{2}) G(\frac{p}{2}, q + \frac{1}{2})}{\sqrt{p} G(p)}$. (20)

3. Kết quả và thảo luận

Từ các kết quả tính toán, chúng tôi đã xây dựng chương trình tính toán tự động dựa trên ngôn ngữ FORTRAN. Trong chương trình có sử dụng gói LAPACK tìm nghiệm cho bài toán hàm riêng trị riêng trong thư viện Intel Math Kernel. Kết quả thu được nghiệm số cho các trạng thái ứng với các số lượng tử k lên đến hàng trăm và số lượng tử từ m=0 với độ chính xác ổn định khoảng tám chữ số thập phân khi kết quả viết dưới dạng chuẩn. Để minh họa, trong các Bảng 1-4, chúng tôi trình bày kết quả cho một số trạng thái có thể so sánh được với các kết quả trong công trình [5] và một số kết quả mở rộng khác. Để dễ so sánh, ở đây cường độ từ trường được thể hiện qua đại lượng g' = g / (g + 1). Năng lượng của các trạng thái có m dương có thể được suy ra từ các trạng thái có m âm dựa vào

mối quan hệ: $E_{k,m} = E_{k,-m} + mg$. Kết quả cho thấy FK-OM cải tiến cho phép thu được nghiệm số cho bài toán. Kết quả này không có độ chính xác cao như trong công trình [5] khi sử dụng phép biến đổi Levi-Civita (20 chữ số thập phân). Một trong những lí do là do trong công trình [5], chương trình tính toán sử dụng gói hỗ trợ cho phép các dữ liệu đạt đến độ chính xác là 50 chữ số thập phân, trong công trình này, do mặc định của gói LAPACK, các dữ liệu chỉ đạt đến độ chính xác tối đa là 15 chữ số thập phân. Việc phát triển bộ code để thu được kết quả chính xác hơn cần được nghiên cứu tiếp. Tuy nhiên, những kết quả đã đạt được vẫn đủ cho các phân tích giải tích để tìm hiểu bản chất hệ vật lí.

Mặt khác, từ các số liệu thu được, ta có thể thấy FK-OM cải tiến không hiệu quả cho miền từ trường nhỏ. Trong quá trình chạy chương trình tìm các năng lượng chính xác cho các trạng thái $k=0, m=-4$ tới $k=168, m=-9$, chúng tôi thấy rằng với các trường hợp từ trường mạnh (γ' cỡ 0.65 trở lên) thì vùng lựa chọn tham số tự do để nghiệm hội tụ về nghiệm chính xác rộng hơn so với vùng lựa chọn tham số tự do trong vùng từ trường yếu (γ' cỡ 0.35 trở xuống). Cụ thể, đối với trạng thái có $k=8, m=-9$: trong từ trường yếu $\gamma'=0.15$ có vùng lựa chọn tham số ω để có nghiệm chính xác 10 chữ số thập phân nằm trong khoảng (0.25, 0.50); trong từ trường mạnh $\gamma'=0.85$ có vùng lựa chọn tham số ω để nghiệm chính xác 10 chữ số thập phân nằm trong khoảng (1.25, 6.00). Điều này là phù hợp với dự đoán ban đầu, vùng lựa chọn tham số ω để nghiệm hội tụ chính xác sẽ rộng hơn trong vùng từ trường mạnh. Điều này có thể giải thích là do khi kết hợp phép biến đổi Laplace vào phương pháp toán tử FK để tìm năng lượng chính xác, phần tương tác từ trường là phần chính và phần tương tác Coulomb là phần nhiễu loạn. Mặt khác, từ Bảng 4, ta thấy rất khó có thể xác định được các giá trị năng lượng của các trạng thái kích thích cao trong vùng từ trường yếu. Trong vùng từ trường yếu ($\gamma'=0.05$ tới $\gamma'=0.35$), ta không tìm được giá trị của tham số ω để xác định nghiệm số chính xác của một số trạng thái kích thích cao. Từ đó, ta có thể kết luận là trong vùng từ trường mạnh, FK-OM kết hợp với phép biến đổi Laplace tìm năng lượng chính xác có phần dễ dàng hơn so với trong vùng từ trường yếu.

Ngoài ra, trong Bảng 3 ta cũng có thể thấy rằng độ chính xác của các kết quả ứng với các trạng thái có số số lượng tử từ $m=0$ bị giảm còn ba chữ số thập phân. Điều này có thể giải thích rằng đối với trường hợp $m=0$, đóng góp của từ trường trong phần chính của Hamiltonian bị giảm đi đáng kể, dẫn đến việc hội tụ chậm.

Như vậy có thể nói, việc kết hợp phép biến đổi Laplace trong FK-OM không thể thay thế được hoàn toàn được phép biến đổi Levi-Civita trong việc tìm nghiệm số chính xác. Tuy nhiên, với khả năng áp dụng của FK-OM cải tiến trong vùng từ trường lớn, hai hướng

phát triển FK-OM này có thể bổ khuyết cho nhau khi tìm nghiệm cho các bài toán hệ nguyên tử hai chiều. Hơn nữa, việc phát triển FK-OM với phép biến đổi Laplace là cần thiết cho sự mở rộng sang các hệ nguyên tử phức tạp hơn.

Bảng 1. Năng lượng ứng với trạng thái $2p^-$, $3p^-$, $4p^-$ ($m = -1$). Kết quả được so sánh với nghiệm số chính xác thu được bằng FK-OM kết hợp với phép biến đổi Levi-Civita trong công trình [5]. Kết quả cho thấy nghiệm có độ chính xác ổn định là tám chữ số thập phân.

g'	$2p^-(k=0, m=-1)$	$3p^-(k=1, m=-1)$	$4p^-(k=2, m=-1)$
0.05	-0.24474134	-0.08036721	0.00090050
0.15	-0.27410756	0.00108637	0.21323373
0.25	-0.28409801	0.14986742	0.52606940
0.35	-0.27398063	0.37170668	0.96036057
0.45	-0.23736745	0.69769322	1.57415466
0.55	-0.15849200	1.19360373	2.48370977
0.65	0.00008428	2.00503229	3.94243430
0.75	0.34214588	3.51694576	6.61507130
0.85	1.27112332	7.16153917	12.95785147
0.95	6.70030514	26.07692664	45.30314463

Bảng 2. Năng lượng ứng với trạng thái $3d^-$, $4d^-$, $5d^-$ ($m = -2$), được so sánh với nghiệm số chính xác thu được bằng FK-OM kết hợp với phép biến đổi Levi-Civita trong công trình [5]. Kết quả cho thấy nghiệm có độ chính xác ổn định là tám chữ số thập phân.

g'	$3d^-(k=0, m=-2)$	$4d^-(k=1, m=-2)$	$5d^-(k=2, m=-2)$
0.05	-0.11440510	-0.03603819	0.02905749
0.15	-0.13674173	0.06842568	0.26190026
0.25	-0.13064401	0.23628341	0.59077510
0.35	-0.10076026	0.47676457	1.04063336
0.45	-0.04057485	0.82292516	1.67121288
0.55	0.06740516	1.34249561	2.60039856
0.65	0.26432778	2.18414967	4.08414376
0.75	0.66251797	3.73942662	6.79260902
0.85	1.69141167	7.46015607	13.19819451
0.95	7.42860734	26.60790678	45.73489523

Bảng 3. Năng lượng ứng với trạng thái 1s, 2s, 3s. Hiệu quả của FK-OM cải tiến giảm đi khi $m = 0$, độ chính xác của nghiệm thu được chỉ đạt đến ba chữ số thập phân.

g'	1s ($k = 0, m = 0$)	2s ($k = 1, m = 0$)	3s ($k = 2, m = 0$)
0.05	-1.999	-0.244	-0.114
0.15	-1.998	-0.274	-0.136
0.25	-1.994	-0.284	-0.130
0.35	-1.986	-0.273	-0.100
0.45	-1.969	-0.237	-0.040
0.55	-1.934	-0.158	0.067
0.65	-1.856	0.000	0.264
0.75	-1.665	0.342	0.662
0.85	-1.059	1.271	1.691
0.95	3.231	6.700	7.428

Bảng 4. Năng lượng cho một số trạng thái kích thích cao. Hiệu quả của FK-OM cải tiến giảm trong vùng từ trường nhỏ.

g'	$k = 159, m = -7$	$k = 133, m = -7$	$k = 164, m = -9$
0.05			
0.15			
0.25			
0.35			
0.45	130.40557544	109.127292561	134.50154056
0.55	194.829041501	163.044475049	200.94633148
0.65	294.214603648	247.777955911	305.36536685
0.75	475.318841822	400.308578818	493.32888931
0.85	903.584870478	756.236927551	931.93150450
0.95	3030.04505702	2536.01831107	3125.0694106

4. Kết luận

Trong bài báo này, FK-OM kết hợp phép biến đổi Laplace đã được áp dụng để tìm nghiệm số chính xác của phương trình Schrödinger cho exciton hai chiều trong từ trường đều. Chúng tôi đã xây dựng được chương trình tính toán tự động dựa trên ngôn ngữ

FORTTRAN cho phép xác định năng lượng của các trạng thái với các chỉ số lượng tử lên đến hàng trăm. Đối với trạng thái ứng với số lượng tử từ $m^1 = 0$, độ chính xác đến tám chữ số thập phân. Đối với trạng thái ứng với số lượng tử từ $m = 0$, độ chính xác giảm còn ba chữ số thập phân. Thêm vào đó, trong vùng từ trường yếu ta rất khó xác định nghiệm cho các trạng thái kích thích cao. Như vậy có thể nói, việc kết hợp phép biến đổi Laplace trong FK-OM không thể thay thế được hoàn toàn được phép biến đổi Levi-Civita trong việc tìm nghiệm số chính xác. Tuy nhiên, với sự hiệu quả của FK-OM cải tiến trong vùng từ trường lớn, hai phép biến đổi có thể được kết hợp với FK-OM để bổ khuyết cho nhau khi tìm nghiệm cho các bài toán hệ nguyên tử hai chiều. Hơn nữa, việc phát triển FK-OM với phép biến đổi Laplace là cần thiết cho sự phát triển sang các hệ nguyên tử phức tạp hơn.

Lời cảm ơn: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 103.01-2014.44.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Mak K. F. and Shan J., "Photonics and optoelectrics of 2D semiconductor transition metal dichalcogenides," *Nature Photonics* **10**, pp. 216-226, 2016.
- [2] Hao K. et al., "Direct measurement of exciton valley coherence in monolayer WSe₂," *Nature Phys.* **12**, pp. 1-7, 2016.
- [3] Miller R. C., Kleinman D. A., Tsang W. T. and Grossard A. C., "Observation of the excited level of excitons in GaAs quantum wells," *Physical Review B* **24**, 2, pp. 1134-1136, 1981.
- [4] Branis S. V., Cen J. and Bajaj K. K., "Effect of magnetic fields on exciton binding energies in type-II GaAs-AlAs quantum-well structures," *Physical Review B* **44**, 20, pp. 196-202, 1991.
- [5] 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 B* **423**, pp. 31-37, 2013.
- [6] Hoang D. Ngoc-Tram, Nguyen P. Duy-Anh, Hoang Van-Hung and Le Van-Hoang, "Highly accurate analytical energy of a two-dimensional exciton in a constant magnetic field," *Physica B* **495**, pp. 16-20, 2016.
- [7] Pino R. and Villalba V. M., "Scaled variational computation of the energy spectrum of a two-dimensional hydrogenic donor in a magnetic field of arbitrary strength," *Revista Mexicana de Fisica* **47**, 2, pp. 24-29, 2001.
- [8] Soylu A. and Boztosun I. (2008), "Asymptotic iteration method solution of the energy spectrum of two-dimensional screened donor in a magnetic field," *Physica E* **40**, 3, pp. 443-448.

- [9] Feranchuk I. D. and Komaro L. I., “The operator method of the approximate solution of the Schrödinger equation,” *Physics Letters A* **88**, 5, pp. 211-214, 1982.
- [10] Lý Duy Nhất, Huỳnh Nguyễn Thanh Trúc, Nguyễn Văn Hoa, Nguyễn Phương Duy Anh và Lê Văn Hoàng, “Phương pháp toán tử FK cho bài toán nguyên tử hydro trong từ trường với cường độ bất kì,” *Tạp chí Khoa học – Trường Đại học Sư phạm TPHCM*, **40**(74) (Khoa học tự nhiên & công nghệ), tr. 56-62, 2012.
- [11] Hoàng Đỗ Ngọc Trâm, Lê Quý Giang, Nguyễn Thị Mận và Lê Văn Hoàng, “Phương pháp đại số cho bài toán exciton âm trong bán dẫn hai chiều,” *Tạp chí Khoa học – Trường Đại học Sư phạm TPHCM*, **43**(77) (Khoa học tự nhiên & công nghệ), tr. 24-32, 2013.