



## THỂ MÀN CHẮN CUDAZZO HIỆU CHỈNH VÀ YẾU TỐ MA TRẬN CHO BÀI TOÁN EXCITON HAI CHIỀU TRONG TỪ TRƯỜNG

Nguyễn Hữu Phước<sup>1</sup>, Trần Đình Bảo Trân<sup>2</sup>, Lê Đại Nam<sup>3</sup>, Hoàng Đỗ Ngọc Trâm<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh

<sup>2</sup>Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐHQG TP HCM

<sup>3</sup>Viện Tiên tiến Khoa học vật liệu – Trường Đại học Tôn Đức Thắng

Ngày nhận bài: 19-9-2018, ngày nhận bài sửa: 15-10-2018, ngày duyệt đăng: 21-12-2018

### TÓM TẮT

Chúng tôi tiến hành hiệu chỉnh thể màn chắn Cudazzo từ dạng gốc để mô tả ảnh hưởng của môi trường lên phổ năng lượng của exciton. Phương pháp toán tử FK được sử dụng kết hợp với phép biến đổi Levi – Civita để giải quyết bài toán exciton trong từ trường. Dạng tường minh của hàm sóng và yếu tố ma trận của bài toán được trình bày cụ thể trong công trình này.

**Từ khóa:** exciton hai chiều, phương pháp toán tử FK, yếu tố ma trận, thể màn chắn Cudazzo hiệu chỉnh.

### ABSTRACT

#### *The Cudazzo-like screening potential and the matrix elements of exciton in two dimension in magnetic field*

We have modified the Cudazzo screening potential to describe the effect of the environment on the exciton spectra. The FK operator method is used in the combination with the Levi – Civita transformation to solve the problem of exciton in magnetic field. The explicit form of the wave function and the matrix elements is presented in this work.

**Keywords:** exciton 2D, FK operator method, matrix elements, Cudazzo-like screening potential.

### 1. Mở đầu

TMDs (Transition Metal Dichalcogenides) là dòng vật liệu có cấu trúc phân tử tạo thành từ một kim loại chuyển tiếp (M) liên kết với hai chalcogen (X) có công thức chung là  $MX_2$ , trong thực nghiệm người ta quan tâm đến các vật liệu với M: Mo, W và X: S, Se, Te. Kế thừa được những ưu điểm từ graphene [1], [2], và sở hữu khe cấm năng lượng vào khoảng 1 ~ 3 eV [3], [4] các đơn lớp TMDs có tiềm năng mạnh mẽ trong công nghệ bán dẫn và các lĩnh vực khác [5]. Trong bán dẫn đơn lớp TMDs thì việc hình thành exciton chiếm ưu thế [6] (chiếm 1/3 ~ 1/2 tổng số chuyển dời) trong các chuyển dời quang học, do đó, đối tượng này ảnh hưởng mạnh đến tính chất quang của vật liệu, vậy nên việc xác định năng lượng exciton trong các đơn lớp này là một trong những hướng nghiên cứu được các tác giả quan tâm trong những năm gần đây [4], [6].

\* Email: tramhdn@hcmue.edu.vn

Để mô tả đầy đủ ảnh hưởng của môi trường lên đối tượng exciton, ta không thể chỉ sử dụng hằng số điện môi và xem đơn giản tương tác giữa electron và lỗ trống là tương tác Coulomb, mà phải tính toán chi tiết thông qua thế màn chắn [4]. Thế màn chắn phổ biến được đa số các tác giả chấp nhận để xét ảnh hưởng của môi trường lên exciton là của nhóm tác giả Keldysh [7] đưa ra vào năm 1979, thế này mô tả khá tốt lí thuyết so với thực nghiệm [4]. Bên cạnh đó, việc sử dụng từ trường trong khảo sát phổ năng lượng exciton có tác dụng làm tăng tương tác giữa electron và lỗ trống [8] làm cho phổ năng lượng trở nên rõ nét hơn, thêm vào đó cũng liên quan đến các vấn đề như: hiệu ứng Zeeman [9], hiệu ứng valley [10]... nên bài toán exciton trong từ trường với một thế màn chắn thích hợp có ý nghĩa trong việc xây dựng lí thuyết cho các hiệu ứng trên.

Trong công trình này, để xác định được các yếu tố ma trận cho bài toán chúng tôi sử dụng phương pháp toán tử FK [11]. Ý tưởng chính của phương pháp này là biểu diễn hàm sóng cần tìm dưới dạng tổ hợp tuyến tính bộ hàm cơ sở là bộ dao động tử điều hòa. Chúng tôi đã áp dụng phương pháp FK thành công trong công trình trước đây với thế màn chắn Yukawa [12] dạng  $e^{-kr}/r$ , tuy vậy, thế này còn thô sơ chưa mô tả được đầy đủ ảnh hưởng của môi trường. Phương pháp toán tử FK gặp khó khăn khi áp dụng thế màn chắn Keldysh do dạng của thế này khá phức tạp gây trở ngại trong quá trình xử lí tính toán đại số. Trong công trình [13], chúng tôi đã tiến hành hiệu chỉnh thế Yukawa gốc để đưa nó về dạng của thế Keldysh nhưng vẫn giữ được sự đơn giản trong biểu thức của nó, thế này mô tả khá tốt năng lượng ở trạng thái cơ bản, tuy nhiên, với các trạng thái bậc cao xuất hiện sự sai khác. Với mục đích tìm một thế màn chắn đơn giản hơn thế Keldysh nhưng vẫn đủ hiệu quả để mô tả phù hợp với thực nghiệm, trong công trình này, chúng tôi sẽ hiệu chỉnh thế Cudazzo từ thế gốc [14] và sử dụng nó để mô tả ảnh hưởng của môi trường lên phổ năng lượng exciton.

Bài báo gồm những phần sau: mở đầu là phần giới thiệu, tiếp theo là những lập luận để xây dựng thế màn chắn Cudazzo hiệu chỉnh, cuối cùng là quy trình tính toán dẫn đến kết quả là dạng tường minh của hàm sóng và yếu tố ma trận của bài toán.

## 2. Thế màn chắn Cudazzo hiệu chỉnh

Trong công trình [4], Chemikov cùng các cộng sự đã chỉ ra việc sử dụng thế Coulomb để mô tả ảnh hưởng của môi trường lên exciton là không đầy đủ, thậm chí công trình còn cho thấy sự thay đổi hằng số điện môi theo các trạng thái của exciton. Để mô tả đầy đủ được ảnh hưởng của môi trường, tác giả đã xét đến sự có mặt của thế màn chắn, cụ thể là thế Keldysh, trong hệ đơn vị SI nó có dạng [7]

$$V_{Keldysh}(r) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \frac{1}{2} \frac{p}{\epsilon} H_0 \left( \frac{r}{r_0} \right) \frac{\epsilon_r}{\epsilon} Y_0 \left( \frac{r}{r_0} \right) \quad (1)$$

trong đó, các hàm  $H_0(r/r_0)$  và  $Y_0(r/r_0)$  lần lượt là hàm Struve và hàm Bessel loại hai, còn  $r_0$  là khoảng cách đặc trưng tùy thuộc vào vật liệu. Đối với phương pháp FK thì các

hàm này khá phức tạp gây khó khăn trong quá trình tính toán. Dựa trên các tiệm cận khi xét đến khoảng cách  $r \gg r_0$  và  $r \ll r_0$  của thế màn chắn Keldysh

$$\lim_{r \gg r_0} V_{Keldysh}(r) = \lim_{r \gg r_0} V_{Cudazzo}(r) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left[ \ln \left( \frac{2r}{r_0} \right) + \ln 2 - g_0 \right] \quad (1)$$

$$\lim_{r \ll r_0} V_{Keldysh}(r) = \lim_{r \ll r_0} V_{Cudazzo}(r) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Cudazzo và các tác giả khác đã đề xuất thế màn chắn khác có dạng như sau [14]:

$$V_{Cudazzo}(r) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left[ \ln \left( \frac{2r}{r_0} \right) + \frac{r_0}{r} \right] (\ln 2 - g_0) \exp \left( - \frac{r}{r_0} \right) \quad (2)$$

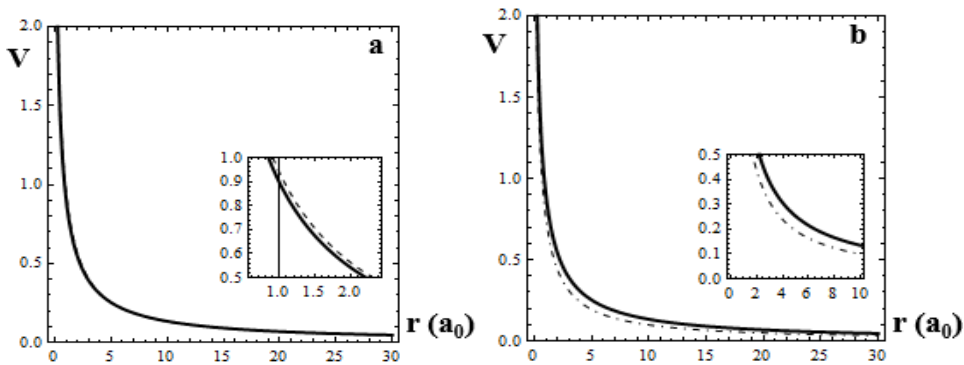
trong đó,  $e_0$  là hằng số điện,  $e$  là hằng số điện môi,  $g_0$  là hằng số Euler – Mascheroni ( $g_0 \approx 0.5772$ ). Thế màn chắn này có dạng đơn giản hơn thế Keldysh khi nó là tổ hợp của hàm logarithm tự nhiên và hàm e mũ, nhưng có độ tương thích cao với thế của Keldysh trong toàn miền  $r$  khi sai số tương đối giữa hai thế này cao nhất chỉ vào khoảng 3% [14]. Chúng tôi tiến hành hiệu chỉnh từ thế gốc và đưa ra dạng như sau:

$$V_{Cudazzo-like}(r) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left[ \ln \left( \frac{2r}{r_0} \right) + \frac{r_0}{r} + \frac{cr_0}{r} \right] \exp \left( - \frac{r}{r_0} \right) (\ln 2 - g_0) \quad (3)$$

trong đó,  $c$  là tham số mô tả sai số tương đối giữa thế gốc và thế hiệu chỉnh. Ta có thể thấy được ý nghĩa của tham số này qua việc xét đến các tiệm cận khi  $r \gg r_0$  và  $r \ll r_0$  sau đây:

$$\lim_{r \gg r_0} V_{Cudazzo-like}(r) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left[ \ln \left( \frac{2r}{r_0} \right) + \ln 2 - g_0 \right] \quad (4)$$

$$\lim_{r \ll r_0} V_{Cudazzo-like}(r) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} (1 + c) \quad (5)$$



Hình 1. Sự tương thích về dáng điệu giữa thế Cudazzo hiệu chỉnh (nét liền đậm) với thế Cudazzo gốc (nét đứt) (a), và thế Keldysh (chấm gạch) (b)

Như vậy, khi xét tiệm cận  $r \gg 0$  (5) thì cả ba thể màn chắn cho cùng giá trị, còn khi  $r \gg +\infty$  (6) thì xuất hiện sự sai khác giữa thể gốc và thể hiệu chỉnh biểu hiện qua tham số  $c$ , ta có thể chọn  $c$  đủ nhỏ để giảm sự sai khác giữa hai thể. Hình 1a với giá trị  $c = 0,01$  ta thấy sự tương thích cao về dáng điệu giữa thể hiệu chỉnh và thể gốc trong toàn miền giá trị. Với Hình 1b ta thấy có sự sai khác giữa hai thể trong vùng  $r$  nhỏ và trung bình ( $1,5a_0 \sim 20a_0$ ), tuy nhiên thể hiệu chỉnh vẫn giữ được dáng điệu của thể Keldysh và tương thích tốt với thể Keldysh ở các tiệm cận.

Thể Cudazzo được hiệu chỉnh đã xuất hiện dạng  $e^{-kr}/r$  là dạng quen thuộc trong các công trình trước đây mà chúng tôi đã giải quyết thành công với phương pháp toán tử FK. Trong phần tiếp theo, chúng tôi sẽ sử dụng thể Cudazzo vừa hiệu chỉnh vào bài toán exciton trong từ trường.

### 3. Bài toán exciton hai trong từ trường với thể màn chắn Cudazzo hiệu chỉnh

#### 3.1. Phép biến đổi Levi – Civita và bài toán nguyên tử

Phương trình Schrodinger không thứ nguyên cho exciton trong từ trường với thể màn chắn Cudazzo hiệu chỉnh có dạng như sau:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} - \frac{ig}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - y \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \frac{g^2}{8} (x^2 + y^2) \Psi(x, y) \\ & - \frac{1}{r_0} \ln \left| \frac{x}{r_0} + \frac{r_0}{r} \right| + c \frac{r_0}{r} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{(\ln 2 - g_0) r}{c r_0} \right) \right] \Psi(x, y) = E \Psi(x, y). \end{aligned} \quad (6)$$

Trong phương trình trên thứ nguyên của năng lượng là  $m^* e^4 / 16 p^2 e^2 e_0^2 \hbar^2 = 2R_y^*$  với  $R_y^*$  là hằng số Rydberg hiệu dụng, thứ nguyên của độ dài là  $4pe_0 \hbar^2 / m^* e^2$  tương đương với bán kính Bohr hiệu dụng. Tác dụng của trường ngoài sẽ thể hiện thông qua cường độ từ trường không thứ nguyên  $g = \hbar w_c / 2R_y^*$  (với  $w_c = eB / 2pm^*$ ) như sau:  $g \ll 1$  từ trường yếu,  $g \gg 1$  từ trường trung bình và  $g \gg 1$  từ trường mạnh.

Như đã đề cập, chúng tôi sẽ sử dụng phương pháp toán tử FK để giải quyết vấn đề, để bài toán đang xét phù hợp với ý tưởng chính của phương pháp, trước hết ta cần biến đổi phương trình (7) về dạng của bài toán dao động tử. Công trình [16] đã chỉ ra việc có thể đưa bài toán nguyên tử trong không gian  $(x, y)$  sang bài toán dao động tử điều hòa/phi điều hòa trong không gian  $(u, v)$  với sự trợ giúp của phép biến đổi Levi – Civita [15]:

$$\begin{cases} x = u^2 - v^2, \\ y = 2uv. \end{cases} \quad (7)$$

Phương trình Schrodinger qua phép biến đổi Levi – Civita có dạng

$$\left[ -\frac{1}{8} \left( \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right) - i\gamma \frac{\hat{L}_z}{4} (u^2 + v^2) + c \exp \left( \frac{-(\ln 2 - \gamma_0)(u^2 + v^2)}{c r_0} \right) + \frac{\gamma^2}{8} (u^2 + v^2)^3 - c - \frac{(u^2 + v^2)}{r_0} \ln \left( 1 + \frac{r_0}{(u^2 + v^2)} \right) \right] \Psi(u, v) = E(u^2 + v^2) \Psi(u, v). \quad (8)$$

Từ hai số hạng đầu trong phương trình (9) ta có thể thấy được dạng quen thuộc của bài toán dao động tử điều hòa, các số hạng còn lại có thể xem như thành phần gây nhiễu loạn. Từ đó, ta có cơ sở để áp dụng phương pháp toán tử FK để giải quyết bài toán. Tới đây bài toán có thể giải theo cả hai hướng là tính toán giải tích và tính toán đại số. Đối với số hạng cuối cùng chúng tôi gặp khó khăn khi có mặt hàm logarithm tự nhiên nên sẽ sử dụng tính toán giải tích, các số hạng còn lại có thể thuận lợi tiến hành tính toán đại số như trong các công trình trước.

### 3.2. Tính toán đại số

Trong phần này, chúng tôi sẽ trình bày cách đưa các số hạng trong phương trình (9) về dạng đại số thông qua các toán tử sinh hủy, sau đó sẽ xây dựng bộ hàm sóng cơ sở ở dạng đại số và cung cấp một số công thức tác dụng ứng với bộ hàm vừa xây dựng.

#### 3.2.1. Các toán tử sinh hủy

Để đưa các số hạng trong phương trình (9) về dạng đại số ta sử dụng các toán tử sinh hủy sau:

$$\begin{cases} \hat{u} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{a} + \frac{\hbar}{i m \omega} \hat{a}^\dagger \right) \\ \hat{v} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{b} + \frac{\hbar}{i m \omega} \hat{b}^\dagger \right) \end{cases} \quad (9)$$

trong đó, xuất hiện hệ thức giao hoán  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$ , các giao hoán tử còn lại bằng 0. Các toán tử trung hòa  $\hat{u}^\dagger \hat{u}$ ,  $\hat{v}^\dagger \hat{v}$  theo định nghĩa trên có nghiệm riêng là bộ dao động tử điều hòa. Trong phương trình (9), ta có thể thấy được sự bảo toàn của toán tử  $\hat{L}_z$ , như vậy  $\hat{L}_z$  và các toán tử trung hòa sẽ có chung bộ hàm riêng, hay nói cách khác  $\hat{L}_z$  cũng có thể biểu diễn dưới dạng tổ hợp tuyến tính của các toán tử trung hòa. Để đưa  $\hat{L}_z$  về dạng trung hòa chúng tôi đưa ra các toán tử sinh hủy mới như sau:

$$\begin{aligned}
\hat{a} &= \frac{1}{2\sqrt{2w}} \left[ (w+1)(\hat{u} + i\hat{v}) + (w-1)(\hat{u}^+ + i\hat{v}^+) \right] \\
\hat{a}^+ &= \frac{1}{2\sqrt{2w}} \left[ (w-1)(\hat{u} - i\hat{v}) + (w+1)(\hat{u}^+ - i\hat{v}^+) \right] \\
\hat{b} &= \frac{1}{2\sqrt{2w}} \left[ (w+1)(\hat{u} - i\hat{v}) + (w-1)(\hat{u}^+ - i\hat{v}^+) \right] \\
\hat{b}^+ &= \frac{1}{2\sqrt{2w}} \left[ (w-1)(\hat{u} + i\hat{v}) + (w+1)(\hat{u}^+ + i\hat{v}^+) \right]
\end{aligned} \tag{10}$$

trong đó,  $\langle \hat{a}, \hat{a}^+ \rangle = \langle \hat{b}, \hat{b}^+ \rangle = 1$ , các giao hoán tử còn lại bằng 0,  $w$  là tham số tự do đưa vào để hiệu chỉnh hàm sóng. Toán tử  $\hat{L}_z$  được biểu diễn thông qua các toán tử sinh hủy mới có dạng

$$\hat{L}_z = \frac{1}{2} (-\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b}). \tag{11}$$

Trong phần tiếp theo, chúng tôi sẽ cần xây dựng bộ hàm cơ sở và tính toán các tác dụng của các toán tử sinh hủy lên bộ hàm này.

### 3.2.2. Bộ hàm cơ sở dạng đại số

Dạng đại số của bộ hàm cơ sở cho dao động tử điều hòa hai chiều được đưa ra dưới dạng:

$$|n_a, n_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_a! n_b!}} (a^\dagger)^{n_a} (b^\dagger)^{n_b} |0(\omega)\rangle, \tag{12}$$

với  $n_a, n_b$  là các số nguyên không âm.  $|0(\omega)\rangle$  là trạng thái chân không thỏa các hệ thức

$$\begin{aligned}
\langle 0(\omega) | 0(\omega) \rangle &= 1, \\
\hat{a}(\omega) | 0(\omega) \rangle &= \hat{b}(\omega) | 0(\omega) \rangle = 0.
\end{aligned} \tag{13}$$

Như đã đề cập, bộ hàm cơ sở sẽ là bộ hàm riêng của toán tử  $\hat{L}_z$  hay nói cách khác bộ hàm này có xét đến sự bảo toàn của toán tử hình chiếu moment động lượng  $\hat{L}_z$ . Do đó, thay vì sử dụng bộ hàm có dạng như công thức (13) chúng tôi sẽ sử dụng dạng sau:

$$|n(m)\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-m)!(n+m)!}} (\hat{a}^\dagger)^{n-m} (\hat{b}^\dagger)^{n+m} |0(\omega)\rangle. \tag{14}$$

Theo đó chúng ta có các công thức tác dụng

$$\hat{a}^+ \hat{a} |n(m)\rangle = n - m |n(m)\rangle, \tag{15}$$

$$\hat{b}^+ \hat{b} |n(m)\rangle = n + m |n(m)\rangle, \tag{16}$$

$$\begin{aligned}
\hat{N}|n(m)\rangle &= (\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b})|n(m)\rangle = 2n|n(m)\rangle, \\
\hat{M}^+|n(m)\rangle &= \hat{a}^+ \hat{b}^+ |n(m)\rangle = \sqrt{(n+1)^2 - m^2} |n+1(m)\rangle, \\
\hat{M}|n(m)\rangle &= \hat{a} \hat{b} |n(m)\rangle = \sqrt{n^2 - m^2} |n-1(m)\rangle.
\end{aligned} \tag{17}$$

Bộ hàm được xây dựng dưới dạng đại số cùng các công thức tác dụng trên sẽ được sử dụng để tính toán thành phần ma trận cho các số hạng có thể đưa về dạng đại số. Đối với số hạng logarithm tự nhiên không đưa được về dạng đại số chúng tôi sẽ tiến hành tính toán giải tích.

### 3.3. Tính toán giải tích

Trong phần này chúng tôi sẽ xây dựng hàm sóng cơ sở ở dạng giải tích trong tọa độ cực  $(\rho, \phi)$  để phục vụ cho quá trình tính toán yếu tố ma trận cho số hạng logarithm tự nhiên. Để xây dựng dạng của hàm sóng ở dạng tường minh của hàm sóng ở dạng giải tích ta quan tâm đến hai đặc điểm sau của hàm sóng:

- Hàm sóng bảo toàn đại lượng  $\hat{L}_z$ ;
- Hàm sóng giải tích liên hệ với dạng đại số qua biểu thức (18).

$$\hat{b}^+ \hat{b} \Psi_{n,m}(\rho, \phi) = (n+m) \Psi_{n,m}(\rho, \phi), \tag{18}$$

với các toán tử  $\hat{b}^+ \hat{b}$  đã được định nghĩa trong phần 3.2.1.

Chúng tôi định nghĩa tọa độ cực  $(\rho, \phi)$  trong không gian  $(u, v)$  như sau

$$\begin{cases} u = \rho \cos \phi, \\ v = \rho \sin \phi. \end{cases} \tag{19}$$

Với hai đặc điểm nêu trên hàm sóng tường minh trong không gian  $(u, v)$  có biểu thức:

$$\Psi_{n,m}(\rho, \phi) = \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} \sqrt{\frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!}} e^{2im\phi} L_{n-|m|}^{2|m|}(\omega\rho^2) e^{-\frac{\omega\rho^2}{2}} (\omega\rho^2)^{|m|}. \tag{20}$$

Như vậy, chúng tôi xây dựng thành công bộ hàm cơ sở ở cả hai dạng giải tích và đại số. Hàm sóng cần xác định  $|\Psi_{n,m}\rangle$  sẽ được khai triển dưới dạng tổ hợp tuyến tính của các hàm này:

$$|\Psi_{n,m}\rangle = |n(m)\rangle + \sum_{k=m, k \neq n}^{\infty} C_k |k(m)\rangle = \Psi_{n,m}(\rho, \phi) + \sum_{k=m, k \neq n}^{\infty} C_k \Psi_{k,m}(\rho, \phi). \tag{21}$$

## 4. Yếu tố ma trận cho bài toán exciton trong từ trường với thế màn chắn Cudazzo hiệu chỉnh

Khi chuyển về dạng đại số phương trình (9) có dạng

$$\left[ -\frac{\omega}{8}(\hat{M}^+ + \hat{M} - N - 1) + \hat{H}^L - c \right. \\ \left. + \frac{\gamma^2}{8\omega^3}(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N} + 1)^3 + \frac{\gamma}{2} \frac{\hat{L}_z}{\omega}(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N} + 1) \right. \\ \left. c \exp\left(-\frac{\ln 2 - \gamma_0}{r_0 c \omega}(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N} + 1)\right) \right] |\Psi_{n,m}\rangle = E \frac{1}{\omega}(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N} + 1) |\Psi_{n,m}\rangle, \quad (22)$$

trong đó,  $\hat{H}^L$  là số hạng chứa thành phần logarithm tự nhiên. Để thấy được dạng của bài toán hàm riêng trị riêng ta viết phương trình (23) dưới dạng

$$\tilde{H} |\Psi_{n,m}\rangle = E \hat{R} |\Psi_{n,m}\rangle, \quad (23)$$

trong đó,  $\tilde{H}$  là toán tử Hamilton bài toán lúc này,  $\hat{R}$  là các toán tử đi kèm với năng lượng  $E$  trong phương trình (23). Ta cần xác định thành phần của các ma trận  $\langle \Psi_{n',m'} | \tilde{H} | \Psi_{n,m} \rangle$  và  $\langle \Psi_{n',m'} | \hat{R} | \Psi_{n,m} \rangle$  để giải bài toán. Để thuận tiện chúng tôi đặt

$$\langle \Psi_{n',m'} | \tilde{H} | \Psi_{n,m} \rangle = H = H^R + H^S + H^L, \quad (24) \\ \langle \Psi_{n',m'} | \hat{R} | \Psi_{n,m} \rangle = R,$$

trong đó,  $H, H^R, H^S, H^L, R$  là các ma trận với các thành phần khác không được xác định theo công thức sau:

❖ Ma trận  $H^R$

$$H^R_{n,n} = \left( \frac{\omega^2 + 4\gamma m}{8\omega} \right) (2n+1) + \frac{\gamma^2}{4\omega^3} (2n+1) (5n^2 + 5n + 3 - 3m^2) - c, \\ H^R_{n,n+1} = \left( \frac{4\gamma m - \omega^2}{8\omega} + \frac{3\gamma^2}{8\omega^3} (5n^2 + 10n + 6 - m^2) \right) \sqrt{(n+1)^2 - m^2}, \\ H^R_{n,n+2} = \frac{3\gamma^2}{8\omega^3} (2n+3) \sqrt{(n+1)^2 - m^2} \sqrt{(n+2)^2 - m^2}, \quad (25) \\ H^R_{n,n+3} = \frac{\gamma^2}{8\omega^3} \sqrt{(n+1)^2 - m^2} \sqrt{(n+2)^2 - m^2} \sqrt{(n+3)^2 - m^2}.$$

❖ Ma trận  $H^S$

$$H^S_{n,n+s} = c \sum_{k=s}^{n+s-|m|} \frac{1}{(k-s)! k! (1+\mu)^{(s+2n+1)}} \frac{(-\mu)^{(2k-s)} \sqrt{(n+m)!(n-m)!(n+s+m)!(n+s-m)!}}{[n+m-(k-s)]! [n-m-(k-s)]!} \quad (26) \\ s=0, 1, 2, \dots$$



với  $\mu = (\ln 2 - \gamma_0) / r_0 c \omega$ .

❖ Ma trận  $H^L$

$$H_{n,n+s}^L = -\frac{1}{\omega r_0} \sqrt{\frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!}} \sqrt{\frac{(n+s-|m|)!}{(n+s+|m|)!}} \int_0^\infty e^{-k} k^{2|m|+1} L_{n-|m|}^{2|m|}(k) L_{n+s-|m|}^{2|m|}(k) \ln\left(1 + \frac{\omega r_0}{k}\right) dk, \quad (27)$$

trong đó,  $k = \omega \rho^2$ .

❖ Ma trận  $H$

$$H = H^R + H^S + H^L. \quad (28)$$

❖ Ma trận  $R$

$$R_{n,n} = \frac{1}{\omega} (2n+1), \quad (29)$$

$$R_{n,n+1} = \frac{1}{\omega} \sqrt{(n+1)^2 - m^2}.$$

Tất cả các ma trận trên đều có tính chất đối xứng (Vd:  $H_{i,j} = H_{j,i}, \dots$ ). Các phần tử ma trận còn lại giá trị bằng 0.

Với các yếu tố ma trận (26)-(30), ta có thể giải phương trình (24) bằng phương pháp vòng lặp hoặc giải trực tiếp hệ phương trình tuyến tính. Trong công trình tiếp theo, chúng tôi sử dụng gói LAPACK trong thư viện Intel [17] để xác định năng lượng chính xác của bài toán.

## 5. Kết luận

Chúng tôi đã xây dựng thành công bộ hàm cơ sở cho phương pháp toán tử FK ở cả hai dạng đại số và giải tích, dạng tường minh của thành phần ma trận cũng được trình bày chi tiết. Bài toán được xây dựng ở dạng không thứ nguyên nên mang tính phổ quát có thể xét với các vật liệu TMDs khác nhau.

❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.

❖ **Lời cảm ơn:** Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) cho đề tài mã số 103.01-2016.90.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] K. S. Novoselov et al., "Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene," *Nature*, 438, pp. 197-200, 2005.
- [2] K. S. Novoselov, A.K. Geim, "The rise of graphene," *Nature Materials*, 6, pp. 183-91, 2007.
- [3] C. Ruppert et al., "Optical Properties and Band Gap of Single- and Few-Layer MoTe<sub>2</sub> Crystals," *Nano Letters*, 14(11), pp. 6231-6236, 2014.

- [4] A. Chernikov et al., “Exciton Binding Energy and Nonhydrogenic Rydberg Series in Monolayer WS<sub>2</sub>,” *Physical Review Letters*, *113*, p. 076802, 2014.
- [5] L. Yang et al., “Properties, Preparation and Applications of Low Dimensional Transition Metal Dichalcogenides,” *Nano Materials*, *8*(7), 463, 2018.
- [6] B. Zhu et al., “Exciton Binding Energy of Monolayer WS<sub>2</sub>,” *Scientific Reports*, *5*, p. 9218, 2015.
- [7] L. V. Keldysh, “Coulomb interaction in thin semiconductor and semimetal films,” *JETP Letter*, *29*, pp. 658-661, 1979.
- [8] R. J. Elliott, R. Loudon, “Theory of the absorption edge semiconductors in a high magnetic,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, *15*, pp. 196-207, 1960.
- [9] A. V. Stier et al., “Exciton Diamagnetic Shifts and Valley Zeeman Effects in Monolayer WS<sub>2</sub> and MoS<sub>2</sub> to 65 Tesla,” *Nature Communications*, *7*, p. 10643, 2016.
- [10] G. Plechinger et al., “Excitonic valley effects in monolayer WS<sub>2</sub> under high magnetic fields,” *Nano Letters*, *16*(12), pp. 7899-7904, 2016.
- [11] I. D. Feranchuk, L. I. Komarov L. I., “The operator method of approximate solution of the Schrödinger equation,” *Physics Letters A*, *88*, pp. 212-214, 1982.
- [12] Van- Hoang Le et al., “Exact solution of two-dimensional screened donor states in a magnetic field,” *Com. Phys. Suppl.*, pp. 58-63, 2004.
- [13] Dai-Nam Le and Ngoc-Tram D. Hoang, “Binding energy of exciton in monolayer semiconductor WS<sub>2</sub> with Yukawa-like screening potential,” *Journal of Science Natural Sciences and Technology*, *14*(9), pp. 43-50, 2017.
- [14] P. Cudazzo, I. V. Tokatly, and A. Rubio, “Dielectric screening in two-dimensional insulators: Implications for excitonic and impurity states in graphane,” *Physical Review B*, *84*, p. 085406, 2011.
- [15] T. Levi Civita, “Sur la resolution qualitative du problem restraint des trios corps,” *Acta Mathematica*, Springer, 1920.
- [16] Van Hoang Le et al., "The algebraic method for two-dimensional quantum atomic systems," *Journal of Physics A*, *26*, pp.1409-1418, 1993.
- [17] Netlib.org. LAPACK: Linear Algebra PACKage, Subroutine dsygvx.f.  
URL <http://www.netlib.org/lapack/explore-ht-ml/d2/d97/dsyevx-8f.html>.