

# PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ CHO BÀI TOÁN TƯƠNG TÁC ĐIỆN TỬ – LỖ TRỐNG CỦA KHÍ ĐIỆN TỬ HAI CHIỀU VỚI SỰ CÓ MẶT CỦA TỬ TRƯỜNG VÀ THỂ MÀN CHẮN

HOÀNG ĐỖ NGỌC TRÂM, NGÔ ĐÌNH NGUYỄN THẠCH,  
LÊ THỊ NGỌC ANH, LÊ TRẦN THẾ DUY, LÊ VĂN HOÀNG\*

## 1. MỞ ĐẦU

Một trong những hướng nghiên cứu quan trọng trong việc chế tạo vật liệu mới với các tính chất định sẵn là vấn đề tạo ra các hệ thấp chiều. Trong mối liên quan đó, bài toán chuyển động của khí điện tử trong cấu trúc tinh thể hai chiều được nghiên cứu rộng rãi ở những năm gần đây [1-6]. Trong các nghiên cứu này, được sử dụng nhiều nhất là loại tinh thể nhiều lớp bán dẫn, trong đó vùng chứa GaAs hoạt động như là hồ thế năng trong khí vùng  $Al_xGa_{1-x}As$  ( $x \leq 0.45$ ) đóng vai trò các bức tường thế. Những thành tựu mới trong kỹ thuật cấy tinh thể hiện nay cho phép tạo ra các lớp bán dẫn GaAs rất mỏng, đủ để khí điện tử chuyển động trong hồ thế có thể được mô tả với giới hạn hai chiều [1-6]. Nhiều hiện tượng vật lý mới liên tục được phát hiện liên quan đến chuyển động của khí điện tử hai chiều trong từ trường [3]. Vì vậy một trong những bài toán được quan tâm rất nhiều cho đến hiện nay và có ứng dụng thực tiễn là chuyển động khí điện tử hai chiều trên mặt phẳng x-y, trong đó điện tử dẫn tương tác Coulomb với lỗ trống trong từ trường với vectơ cường độ hướng theo chiều z [4-6].

Nếu bỏ qua tương tác giữa các điện tử, phương trình Schrödinger cho trạng thái liên kết điện tử-lỗ trống trong từ trường có thể viết dưới dạng:

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \tag{1}$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{1}{2} i\gamma \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{1}{8} \gamma^2 (x^2 + y^2) - \frac{1}{r} \tag{2}$$

trong hệ đơn vị nguyên tử. Ký hiệu  $m^*$ ,  $c$  lần lượt là khối lượng hiệu dụng của điện tử và hằng số diên môi, khi đó đơn vị năng lượng sẽ là hằng số Rydberg

\* Tiến sĩ Khoa Vật Lý Trường ĐHSPTp.HCM.

hiệu dụng  $R^* = m^* e^4 / 2\hbar^2 \epsilon^2$ , đơn vị độ dài là bán kính Bohr hiệu dụng  $a^* = \epsilon \hbar^2 / e^2 m^*$ . Cường độ từ trường không thứ nguyên được xác định bằng biểu thức:  $\gamma = \hbar \omega_c / 2R^*$ , trong đó  $\omega_c = eB / m^* c$  là tần số chuyển động xoáy ốc với  $B$  là cường độ từ trường. Để đánh giá độ lớn tương đối của từ trường so với tương tác Coulomb ta đưa ra phép so sánh như sau. Thang năng lượng từ trường được đặc trưng bởi giá trị  $\hbar \omega_c = \hbar eB / m^* c$  trong khi thang năng lượng tương tác Coulomb được đặc trưng bởi hằng số Rydberg hiệu dụng  $R^*$ . Như vậy hệ số so sánh giữa hai thang năng lượng là  $\gamma = \hbar \omega_c / 2R^*$ . Từ đây ta có thể gọi từ trường yếu ứng với giá trị  $\gamma \ll 1$  và từ trường mạnh ứng với  $\gamma \gg 1$ .

Trong phần lớn các thí nghiệm với việc sử dụng chất bán dẫn GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As và từ trường ở điều kiện phòng thí nghiệm thì hai thang năng lượng sẽ nằm trong vùng so sánh được với nhau. Nói khác hơn, ngay từ đầu cho đến bây giờ đối tượng đang được nghiên cứu rộng rãi [7] là trường hợp trường trung bình  $\gamma \approx 1$ . Như vậy, để mô tả các thí nghiệm thực tế, xuất hiện nhu cầu giải phương trình Schrödinger (1)-(2) cho miền biến đổi giá trị  $\gamma$  rộng hơn, không chỉ giới hạn trong miền từ trường yếu. Rõ ràng là các phương pháp truyền thống trên cơ sở sử dụng lý thuyết nhiễu loạn khó có thể sử dụng trực tiếp.

Thời gian gần đây, nhiều tác giả quan tâm đến việc giải phương trình (1)-(2) cho toàn miền biến đổi cường độ từ trường bằng các phương pháp khác nhau. Trong số đó cần kể đến là phương pháp biến phân, phương pháp phân tích theo chuỗi  $1/N$  với  $N$  là số chiều của không gian, phương pháp đánh giá xấp xỉ hai điểm Pade [4-6]. Tuy nhiên, theo quan điểm của tác giả thì vấn đề này còn cần được nghiên cứu triệt để hơn nữa. Vì vậy, trong công trình [8] chúng tôi đã đưa ra lời giải chính xác phương trình (1)-(2) bằng phương pháp toán tử (OM). Phương pháp này được đưa ra đầu tiên trong công trình [9] như là một phương pháp không nhiễu loạn giải phương trình Schrödinger, cho phép xét các bài toán cơ học lượng tử với cường độ trường ngoài có giá trị bất kỳ và đã được sử dụng hiệu quả cho một loạt các bài toán trong nhiều lĩnh vực khác nhau của lý thuyết nguyên tử, vật lý chất rắn, lý thuyết trường lượng tử (xem bài viết tổng quan [10]). Việc sử dụng phương pháp toán tử giải phương trình (1)-(2) còn chỉ ra một thế mạnh nữa. Đó là phương pháp này không những cho phép tìm giá trị năng lượng mà còn có thể xây dựng hàm sóng của hệ trong toàn miền thay đổi tham số từ trường [8].

Công trình sau đây là một bước phát triển các kết quả của [8] bằng cách xét bài toán tổng quát hơn, khi không bỏ qua tương tác giữa các điện tử. Tương tác này cùng với ảnh hưởng khác của tinh thể được thể hiện thông qua thế màn chắn dạng Yukawa [6, 11]. Toán tử Hamilton (2) lúc này sẽ có dạng như sau:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{1}{2} i \gamma \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{1}{8} \gamma^2 (x^2 + y^2) - \frac{e^{-\lambda r}}{r}. \quad (2')$$

với  $\lambda$  là hằng số dương. Hằng số này có thể xác định sao cho phổ năng lượng thu được bằng tính toán lý thuyết phù hợp tốt nhất với số liệu thực nghiệm.

## 2. MỐI LIÊN HỆ VỚI BÀI TOÁN DAO ĐỘNG TỬ PHI ĐIỀU HÒA HAI CHIỀU

Bài toán (1)-(2') sẽ trở thành đơn giản hơn nhiều qua cách biểu diễn mới, được đưa ra trong công trình [12]. Thật vậy, qua phép biến đổi Levi-Civita [13]:

$$\begin{cases} x = u^2 - v^2 \\ y = 2uv \end{cases} \quad (3)$$

ta có:  $dx dy = 4(u^2 + v^2) du dv, r = \sqrt{x^2 + y^2} = u^2 + v^2$ .

Từ đây suy ra tích vô hướng vectơ trạng thái trong không gian (x,y) liên quan đến tích vô hướng vectơ trạng thái trong không gian (u,v) thông qua biểu thức liên hệ sau:

$$\langle \psi(x,y) | \varphi(x,y) \rangle = \int dx dy \psi^*(x,y) \varphi(x,y) = \int du dv 4(u^2 + v^2) \psi^*(u,v) \varphi(u,v). \quad (4)$$

Sự xuất hiện trong số  $4(u^2 + v^2)$  trong (4) dẫn đến hệ quả: nếu  $\hat{A}$  là toán tử hermit trong không gian (x,y) thì sẽ tương ứng với  $\tilde{A} = 4(u^2 + v^2) \hat{A}$  là toán tử hermite trong không gian (u,v). Như vậy, để bảo toàn tính hermit của Hamiltonian khi chuyển về không gian (u,v), phương trình (1) cần viết lại như sau:

$$r(\hat{H} - E)\Psi(\mathbf{r}) = 0.$$

Sau phép biến đổi Levi-Civita, phương trình này có dạng:

$$\tilde{H} \Psi(u,v) = 0, \quad (5)$$

với Hamiltonian

$$\tilde{H} = -\frac{1}{8} \left( \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right) - \left( E + \frac{\gamma}{2} \hat{L}_z \right) (u^2 + v^2) + \frac{\gamma^2}{8} (u^2 + v^2)^3 - \exp\{-\lambda(u^2 + v^2)\} \quad (6)$$

hermit trong không gian (u,v). Dễ dàng nhận thấy (6) có dạng toán tử Hamilton cho bài toán dao động tử phi điều hòa trong không gian hai chiều (uv). Như vậy từ bài toán chuyển động của điện tử trong điện từ trường phức tạp ta đã đưa về bài toán đơn giản và được nghiên cứu nhiều trong cơ học lượng tử.

Trong phương trình (5)-(6), năng lượng E chỉ đóng vai trò tham số. Vì vậy sẽ có dạng phương trình tìm trị riêng ta viết lại (5) như sau:

$$\tilde{H} \Psi(u, v) = Z \Psi(u, v) \tag{5'}$$

với Z đóng vai trò trị riêng của phương trình Schrodinger (5')-(6). Sau khi giải phương trình này ta tìm được Z như một hàm phụ thuộc vào tham số E. Vì giá trị của Z luôn là zero nên phương trình:

$$Z(E) = 0 \tag{7}$$

cho ta nghiệm chính xác E.

Để tìm nghiệm hoàn chỉnh của một phương trình động học chúng ta cần xác định các bất biến của hệ. Trong trường hợp phương trình (5') ta dễ dàng kiểm chứng rằng toán tử mô men quỹ đạo (cũng là hình chiếu mô men xung lượng lên trục z)  $\hat{L}_z$  giao hoán với Hamiltonian (6). Điều này tương ứng với việc mô-men quỹ đạo là đại lượng bảo toàn với chuyển động trong trường Coulomb và trường từ. Như vậy hàm sóng cần tìm thỏa mãn phương trình

$$\hat{L}_z \Psi(u, v) = m \Psi(u, v). \tag{8}$$

với  $\hat{L}_z = \frac{i}{2} \left( u \frac{\partial}{\partial v} - v \frac{\partial}{\partial u} \right)$  được viết trong không gian (u,v) và trị riêng của nó sẽ tìm được trong các phần tiếp theo như sau:  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Dựa vào đây, chúng ta sẽ giải phương trình (5') cùng với điều kiện (8). Ngoài ra, chúng ta có thể thay thế toán tử  $\hat{L}_z$  bằng trị riêng của nó trong các phương trình tương ứng.

### 3. PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ (OM) GIẢI PHƯƠNG TRÌNH SCHÖDINGER

Để giải phương trình (5')-(6) bằng phương pháp toán tử OM ta cần thực hiện các bước sau.

**Bước một:** Trước hết chúng ta chuyển phương trình (5')-(6) từ biểu diễn tọa độ (u,v) qua biểu diễn bằng các toán tử sinh hủy. Các toán tử này được định nghĩa bằng các biểu thức:

$$\begin{aligned} \hat{a}(\omega) &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( \xi + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial \xi^*} \right), & \hat{a}^*(\omega) &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( \xi^* - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \\ \hat{b}(\omega) &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( \xi^* + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial \xi} \right), & \hat{b}^*(\omega) &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( \xi - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial \xi^*} \right) \end{aligned} \tag{9}$$

trong đó tọa độ phức được định nghĩa  $\xi = u + iv$ ,  $\xi^* = u - iv$ . Dễ dàng kiểm chứng các toán tử sinh hủy (9) thỏa mãn hệ thức giao hoán

$$\hat{a}\hat{a}^- - \hat{a}'\hat{a} = 1, \quad \hat{b}\hat{b}^+ - \hat{b}'\hat{b} = 1 \tag{10}$$

(các giao hoán tử khác bằng không). Khi định nghĩa các toán tử sinh hủy (9) chúng ta đưa vào một tham số tự do  $\omega$  ( $\omega > 0$ ). Tham số này tạm thời chưa xác định và chúng ta sẽ thấy ở phần tiếp theo rằng việc đưa tham số tự do này vào sơ đồ OM là để tối ưu hóa tốc độ hội tụ của quá trình tính toán. Sau phép biến đổi (9), phương trình (5')-(6) có dạng:

$$\begin{aligned} & \left\{ \left( \frac{\omega}{4} - \frac{2E + m\gamma}{4\omega} \right) (\hat{a}'\hat{a} + \hat{b}'\hat{b} + 1) - \left( \frac{\omega}{4} + \frac{2E + m\gamma}{4\omega} \right) (\hat{a}'\hat{b}' + \hat{a}\hat{b}) \right. \\ & \left. + \frac{\gamma^2}{64\omega^3} (\hat{a}'\hat{b}' + \hat{a}\hat{b} + \hat{a}'\hat{a} + \hat{b}'\hat{b} + 1)^3 \right. \\ & \left. - \exp \left\{ -\frac{\lambda}{2\omega} (\hat{a}'\hat{b}' + \hat{a}\hat{b} + \hat{a}'\hat{a} + \hat{b}'\hat{b} + 1) \right\} \right\} |\Psi\rangle = Z|\Psi\rangle. \end{aligned} \tag{11}$$

Trong phương trình (11), toán tử

$$\tilde{A} = \exp \left\{ -\frac{\lambda}{2\omega} (\hat{a}'\hat{b}' + \hat{a}\hat{b} + \hat{a}'\hat{a} + \hat{b}'\hat{b} + 1) \right\}$$

có thể đưa được về dạng chuẩn như sau:

$$\tilde{A} = \exp \left\{ -\frac{\lambda}{\lambda + 2\omega} \hat{a}'\hat{b}' \right\} \exp \left\{ \ln \left( \frac{2\omega}{\lambda + 2\omega} \right) (\hat{a}'\hat{a} + \hat{b}'\hat{b} + 1) \right\} \exp \left\{ -\frac{\lambda}{\lambda + 2\omega} \hat{a}\hat{b} \right\} \tag{12}$$

nghĩa là toán tử sinh bên trái và toán tử hủy bên phải, vì vậy rất thuận tiện cho việc tính toán đại số.

**Bước hai:** Ta tách Hamiltonian ở phương trình (11) thành hai thành phần như sau:

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \beta \tilde{V} \tag{13}$$

trong đó Hamiltonian  $\tilde{H}_0$  chỉ chứa thành phần giao hoán với các toán tử  $\hat{a}'\hat{a}$  và  $\hat{b}'\hat{b}$ :

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 = & \left( \frac{\omega}{4} - \frac{2E + m\gamma}{4\omega} \right) (\hat{a}'\hat{a} + \hat{b}'\hat{b} + 1) + \\ & + \frac{\gamma^2}{64\omega^3} (\hat{a}'\hat{a} + \hat{b}'\hat{b} + 1) \left( (\hat{a}'\hat{a} + \hat{b}'\hat{b} + 1) (\hat{a}'\hat{a} + \hat{b}'\hat{b} + 4) + 6\hat{a}'\hat{a}\hat{b}'\hat{b} + 2 \right) \\ & - \exp \left\{ \ln \left( \frac{2\omega}{\lambda + 2\omega} \right) (\hat{a}'\hat{a} + \hat{b}'\hat{b} + 1) \right\} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k!)^2} \left( \frac{-\lambda}{2\omega} \right)^{2k} (\hat{a}'\hat{b}')^k (\hat{a}\hat{b})^k. \end{aligned} \tag{14}$$

Còn  $\tilde{V} = \tilde{H} - \tilde{H}_0$  có thể xem như toán tử “nhiều loạn”. Nghiệm gần đúng bậc zero của phương trình (11) chính là nghiệm riêng chính xác của toán tử  $\tilde{H}_0$ , còn các bổ chính bậc cao hơn ta có thể tính theo chuỗi của toán tử  $\beta \tilde{V}$  dựa vào lý thuyết nhiễu loạn. Thừa số  $\beta$  đưa vào trước toán tử  $\tilde{V}$  trong (13) để chỉ rằng toán tử này “nhỏ” hơn toán tử  $\tilde{H}_0$  một bậc; ta gọi là tham số nhiễu loạn và trong kết quả cuối cùng ta sẽ cho  $\beta=1$ . Chúng ta có thể chọn tham số  $\omega$  sao cho

$$\|\tilde{H}_0\| \gg \|\tilde{V}\| \tag{14}$$

được thỏa mãn, đây chính là điều kiện để phương pháp lý thuyết nhiễu loạn có thể sử dụng hiệu quả. Nghĩa là tham số tự do  $\omega$  được chọn sao cho việc tách Hamiltonian ra hai thành phần như (12) có ý nghĩa.

**Bước ba:** Tìm nghiệm gần đúng bậc zero bằng cách giải phương trình

$$\tilde{H}_0 \Psi^{(0)}(u, v) = Z^{(0)} \Psi^{(0)}(u, v) . \tag{15}$$

Dễ dàng nhận thấy rằng nghiệm riêng của  $\tilde{H}_0$  cũng là nghiệm riêng của các toán tử  $\hat{a}^+ \hat{a}$  và  $\hat{b}^+ \hat{b}$ . Hay nói khác hơn nghiệm của (15) là hàm sóng của dao động tử điều hòa hai chiều với các vectơ trạng thái có dạng chuẩn hóa như sau:

$$|n_1 n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2!}} (\hat{a}^+)^{n_1} (\hat{b}^+)^{n_2} |0(\omega)\rangle . \tag{16}$$

Ở đây  $n_1, n_2$  là hai số nguyên dương, còn trạng thái chân không được xác định bởi các phương trình:

$$\hat{a}(\omega)|0(\omega)\rangle = 0, \quad \hat{b}(\omega)|0(\omega)\rangle = 0. \tag{17}$$

Chú ý rằng hệ đang xét bảo toàn mô men quỹ đạo, nghĩa là cần đòi hỏi (16) thỏa mãn phương trình (8). Mà phương trình này khi chuyển về biểu diễn toán tử (9) có dạng như sau:

$$(\hat{a}^- \hat{a} - \hat{b}^+ \hat{b})|\Psi\rangle = 2m|\Psi\rangle$$

cho nên dễ dàng nhận thấy rằng chỉ có các trạng thái

$$|n(m)\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-m)!(n+m)!}} (\hat{a}^+)^{n-m} (\hat{b}^+)^{n+m} |0(\omega)\rangle \tag{18}$$

thỏa mãn yêu cầu của chúng ta với  $n=0,1,2,\dots$  là số lượng tử chính và  $m$  là số lượng tử từ  $-n \leq m \leq n$ . Để sử dụng trong các tính toán cụ thể ta có thể chứng minh các công thức sau:

$$\begin{aligned} \hat{a}^+ \hat{b}^+ |n(m)\rangle &= \sqrt{(n+1)^2 - m^2} |n+1(m)\rangle, \\ \hat{a} \hat{b} |n(m)\rangle &= \sqrt{n^2 - m^2} |n-1(m)\rangle, \\ (\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b}) |n(m)\rangle &= 2n |n(m)\rangle, \end{aligned} \tag{19}$$

dựa vào các hệ thức giao hoán (10) và các phương trình định nghĩa trạng thái chân không (17). Thế vectơ trạng thái (18) vào (11) đồng thời bỏ các thành phần không giao hoán với toán tử trung hòa trong phương trình (11), từ điều kiện  $Z^{(0)}(E_{nm}^{(0)}) = 0$  ta thu được biểu thức để xác định năng lượng riêng tương ứng:

$$E_{nm}^{(0)} = \frac{\omega^2 - m\gamma}{2} + \frac{\gamma^2}{16\omega^2} (5n^2 + 5n + 3 - 3m^2) - \frac{(2\omega)^{2n+2}}{(2n+1)(\lambda+2\omega)^{2n+1}} F_0(n, m, \alpha), \tag{20}$$

với  $\alpha = \frac{\lambda}{2\omega}$ ;  $F_0(n, m, \alpha)$  là trường hợp riêng của hàm số được định nghĩa như sau:

$$F_j(n, m, \alpha) = \sum_{k=0}^{n-m} \frac{(n-m)!(n+m)!}{k!(k+j)!(n-m-k)!(n+m-k)!} \alpha^{2k}. \tag{21}$$

Để dàng kiểm chứng rằng  ${}_jF_j(n, m, \alpha) = {}_2F_1(-n+m, -n-m; j+1; \alpha^2)$  là hàm siêu bội suy biến [15]. Tham số  $\omega$  trong biểu thức năng lượng có thể xác định từ điều kiện:

$$\frac{\partial E_{nm}^{(0)}}{\partial \omega} = 0. \tag{22}$$

Tiêu chí để chọn giá trị  $\omega$  theo phương pháp toán tử đã được thảo luận trong một loạt các công trình (xem [14]) và đã chỉ ra rằng điều kiện (22) cho ta kết quả tương đối chính xác ở gần đúng bậc zero đối với nhiều bài toán khác nhau. Với bài toán chúng ta đang xét, điều kiện (22) dẫn tới phương trình để xác định  $\omega$  như sau:

$$\begin{aligned} \omega^4 - \frac{\gamma^2}{8} (5n^2 + 5n + 3 - 3m^2) \\ - 2\omega^3 \frac{(1+2(n+1)\alpha)F_0(n, m, \alpha) - 2(n^2 - m^2)(1+\alpha)\alpha^2 F_1(n-1, m, \alpha)}{(2n+1)(1+\alpha)^{2n+2}} = 0. \end{aligned} \tag{23}$$

Thế nghiệm thực dương của phương trình trên vào (20) ta có thể tìm được nghiệm giải tích gần đúng cho bài toán đang xét. Ở đây cần chú ý rằng mặc dù (23) là phương trình đa nghiệm chúng ta có thể chọn một giá trị thực dương duy nhất theo quy trình sau. Với trường hợp  $\lambda = 0$ , (23) là phương trình đa thức bậc bốn có một nghiệm thực dương  $\omega_0$ . Với  $\lambda \neq 0$ , trước tiên ta chọn dãy số:  $0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_M = \lambda$ , trong đó  $M$  đủ lớn để các giá trị  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2, \dots, M$ )

tương đối gần nhau. Sau đó giải phương trình (23) ứng với các giá trị  $\lambda_i$  này để tìm nghiệm  $\omega_i$  tương ứng. Chú ý rằng chỉ chọn nghiệm thực dương  $\omega_i$  gần nhất với nghiệm đã có trước đó  $\omega_{i-1}$ . Lần lượt giải như vậy cho đến khi  $i = M$  ta sẽ thu được nghiệm thực dương  $\omega$  ứng với giá trị  $\lambda \neq 0$ .

Để minh họa cho sự chính xác lời giải ở gần đúng bậc thấp của OM, trong bảng 1 đưa ra kết quả  $E_{nm}^{(0)}(\gamma) + \Delta E_{nm}^{(2)}(\gamma)$  và so sánh với lời giải chính xác OM cho trạng thái cơ bản và một vài trạng thái kích thích trong trường hợp  $\lambda = 0$ . Ở đây ta ký hiệu các mức năng lượng như sau:  $ns$  - ứng với  $m = 0$ ;  $np^+$   $\rightarrow$   $m=1$ ;  $np^-$   $\rightarrow$   $m=-1$ ;  $nd^+$   $\rightarrow$   $m=2$ ;  $nd^-$   $\rightarrow$   $m=-2$ ; .... Đối với các trạng thái kích thích bậc cao và với trường hợp từ trường cực mạnh, điều kiện chọn tham số  $\omega$  theo (22) cho kết quả bậc zero OM tương đối không được chính xác. Lúc này ta có thể sử dụng điều kiện hội tụ chuỗi gần đúng nhiễu loạn

$$|E_{nm}^{(0)}| \gg |\Delta E_{nm}^{(2)}| \tag{24}$$

để xác định tham số  $\omega$ . Ở đây  $\Delta E_{nm}^{(2)} = \frac{2\omega}{2n+1} \sum_{k=|m|}^{+\infty} \frac{(\tilde{H}_{nk})^2}{\tilde{H}_{kk}}$  là bổ chính bậc hai vào

năng lượng (bổ chính bậc một  $\Delta E_{nm}^{(1)} = 0$ ) với các yếu tố ma trận được đưa ra trong công thức (28). Cần chú ý là trong biểu thức của các yếu tố ma trận (28) có chứa số hạng năng lượng vì vậy ta cần thay các số hạng này bằng giá trị năng lượng ở gần đúng bậc zero (20). Điều kiện (24) nâng cao đáng kể độ chính xác của kết quả. Cũng trong bảng 1 ta thấy rằng: trong miền từ trường yếu và trung bình kết quả thu được bằng OM ở gần đúng bậc hai rất chính xác tuy nhiên với cường độ từ trường cực lớn độ chính xác này giảm đi đáng kể. Trong khi đó phương pháp biến phân đưa ra trong công trình [6] cho kết quả với độ chính xác ở cả trường yếu và trường từ mạnh là như nhau. Do vậy, để có thể thu được kết quả tương đối chính xác một cách đều đặn trong toàn miền thay đổi từ trường ở gần đúng bậc thấp, ta cần xét đến biểu hiện tiệm cận của hàm sóng khi từ trường lớn  $\gamma \gg 1$ ,

nghĩa là ta cần đưa thêm vào hàm sóng thừa số:  $e^{-v(x^2+y^2)}$ , với  $v$  là tham số biến phân. Lời giải như thế ta sẽ xét ở một công trình khác, trong phần tiếp theo ở bước bốn, chúng ta sẽ đưa ra sơ đồ OM trên cơ sở lý thuyết nhiễu loạn để tìm lời giải bằng số với độ chính xác cho trước bất kỳ.

**Bước 4: Phương pháp toán tử tìm nghiệm bằng số.**

Vì các vectơ trạng thái (18) tạo thành một bộ hàm số cơ sở đầy đủ nên lời giải chính xác của hàm sóng có thể viết dưới dạng chuỗi của các vectơ trạng thái đó như sau:



$$|\Psi_{n(m)}\rangle = |n(m)\rangle + \sum_{\substack{k=|m| \\ k \neq n}}^{\infty} C_k |k(m)\rangle, \tag{25}$$

với các hệ số thực  $C_k$  ( $k = |m|, |m|+1, \dots; k \neq n$ ). Dem (25) thế vào phương trình (11), so sánh các hệ số trước mỗi vectơ trạng thái với nhau, ta thu được hệ phương trình:

$$Z_n = \tilde{H}_{nn} + \sum_{\substack{k=|m| \\ k \neq n}}^{\infty} C_k \beta \tilde{H}_{nk}, \tag{26}$$

$$(Z_n - \tilde{H}_{jj})C_j = \beta \tilde{H}_{jn} + \sum_{\substack{k=|m| \\ k \neq n \\ k \neq j}}^{\infty} C_k \beta \tilde{H}_{jk}, \quad (j = |m|, |m|+1, \dots; j \neq n). \tag{27}$$

Ở đây, lược các yếu tố ma trận  $\tilde{H}_{kj}$  ( $k \neq j$ ) trong (26)-(27) ta đưa tham số nhiễu loạn  $\beta$  vào. Điều này dựa trên cơ sở là  $\tilde{H}_{kk} = (\tilde{H}_0)_{kk}$  với mọi  $k$ ,  $\tilde{H}_{kj} = \tilde{V}_{kj}$  với mọi  $k \neq j$  trong khi đó trong Hamiltonian (13) hệ số  $\beta$  chỉ có trước thành phần toán tử nhiễu loạn. Các yếu tố ma trận của toán tử  $\tilde{H}$  đối với chuyển đổi giữa các trạng thái (18) dễ dàng tính được bằng các phép biến đổi đại số dựa vào các công thức (19). Trước hết ta tính yếu tố ma trận của toán tử  $\hat{A}$  và thu được kết quả như sau:

$$A_{n,m,j} = \langle n(m) | \hat{A} | n+j(m) \rangle = \frac{(-\alpha)^j}{(1+\alpha)^{2n+j+1}} \sqrt{\frac{(n+j-m)!(n+j+m)!}{(n-m)!(n+m)!}} F_j(n, m, \alpha),$$

với  $F_j(n, m, \alpha)$  là hàm số được định nghĩa bằng (21),  $j \geq 0$ . Sau đó ta thu được các yếu tố ma trận của Hamiltonian  $\tilde{H}$  như sau:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{nn} &= \left( \frac{\omega}{4} - \frac{2E + m\gamma}{4\omega} \right) (2n+1) + \frac{\gamma^2}{32\omega^3} (2n+1)(5n^2 + 5n + 3 - 3m^2) - A_{nn}, \\ \tilde{H}_{n,n+1} &= \left( -\frac{\omega}{4} - \frac{2E + m\gamma}{4\omega} + \frac{3\gamma^2}{64\omega^3} (5n^2 + 10n + 6 - m^2) \right) \sqrt{(n+1)^2 - m^2} - A_{n,n+1}, \\ \tilde{H}_{n,n+2} &= \frac{3\gamma^2}{64\omega^3} (2n+3) \sqrt{(n+1)^2 - m^2} \sqrt{(n+2)^2 - m^2} - A_{n,n+2}, \\ \tilde{H}_{n,n+3} &= \frac{\gamma^2}{64\omega^3} \sqrt{(n+1)^2 - m^2} \sqrt{(n+2)^2 - m^2} \sqrt{(n+3)^2 - m^2} - A_{n,n+3}, \\ \tilde{H}_{n,n+j} &= -A_{n,n+j} \quad (j \geq 4). \end{aligned} \tag{28}$$

Dựa vào tính đối xứng  $\tilde{H}_{nh} = \tilde{H}_{kn}$  ta tính được tất cả các yếu tố ma trận khác không còn lại.

Bây giờ ta giải hệ phương trình (26)-(27) bằng cách phân tích theo chuỗi tham số nhiễu loạn  $\beta$ :

$$Z_n = Z_n^{(0)} + \sum_{s=1}^{+\infty} \beta^s Z_n^{(s)}, \tag{29}$$

$$C_j = C_j^{(0)} + \sum_{s=1}^{+\infty} \beta^s C_j^{(s)} \quad (j = |m|, |m|+1, \dots; j \neq n). \tag{30}$$

Thế (29)-(30) vào (26)-(27), sau đó tách ra và so sánh các hệ số theo từng bậc  $\beta^s$  với nhau, ta thu được:

$$Z_n^{(0)} = \tilde{H}_{nn}, \quad Z_n^{(1)} = 0, \quad Z_n^{(s)} = \sum_{\substack{k=|m| \\ k \neq n}}^{+\infty} C_k^{(s-1)} \tilde{H}_{nk} \quad (s \geq 2) \tag{31}$$

với 
$$C_j^{(0)} = 0, \quad C_j^{(1)} = \frac{\tilde{H}_{jn}}{Z_n^{(0)} - \tilde{H}_{jj}},$$

$$C_j^{(s)} = \sum_{\substack{k=|m| \\ k \neq n \\ k \neq j}}^{+\infty} \frac{\tilde{H}_{jk}}{Z_n^{(0)} - \tilde{H}_{jj}} C_k^{(s-1)} - \sum_{t=1}^{s-1} \frac{Z_n^{(s-t)}}{Z_n^{(0)} - \tilde{H}_{jj}} C_j^{(t)} \quad (s \geq 2). \tag{32}$$

Từ (31) ta suy ra được năng lượng  $E_{nn}^{(0)}$  ở gần đúng bậc zero như kết quả (20). Hệ thức truy toán (31) và (32) cho phép ta xác định giá trị riêng và hàm sóng ở bậc gần đúng (s) bất kỳ (cho  $\beta=1$ ):

$$Z_n(s) = \tilde{H}_{nn} + \sum_{k=2}^s Z_n^{(k)},$$

$$C_k(s) = \sum_{l=1}^s C_k^{(l)}.$$

Với mỗi bậc gần đúng s thế  $Z_n(s)$  vào phương trình (7) ta tìm ra giá trị năng lượng  $E_{nn}(s)$  tương ứng. Chú ý rằng phương trình (7) đa nghiệm và để có thể từ đó tìm ra nghiệm thực duy nhất ta tiến hành giải tương tự như khi giải phương trình (23) để tìm  $\omega$ . Các kết quả cụ thể được đưa ra trong các bảng 2 cho ta thấy đây các giá trị thu được:

$$E_{nn}(0), E_{nn}(1), E_{nn}(2), \dots, E_{nn}(s), \dots$$

hội tụ rất nhanh về giá trị  $E_{nm}^T$ , giá trị này vì thế chính là nghiệm bằng số chính xác của phương trình đang xét. Chú ý một điều là trong biểu thức (31), (32) có lấy tổng theo k đến vô cùng, nhưng trong thực tế tính toán, các tổng này có các thành phần nhỏ dần đến không, và khi tính toán ta chỉ lấy tổng trong giới hạn đến độ chính xác của bậc gần đúng đang xét, nghĩa là  $\varepsilon = \left| \frac{Z_n^{(s-1)} - Z_n^{(s-2)}}{Z_n^{(s-1)}} \right|$ .

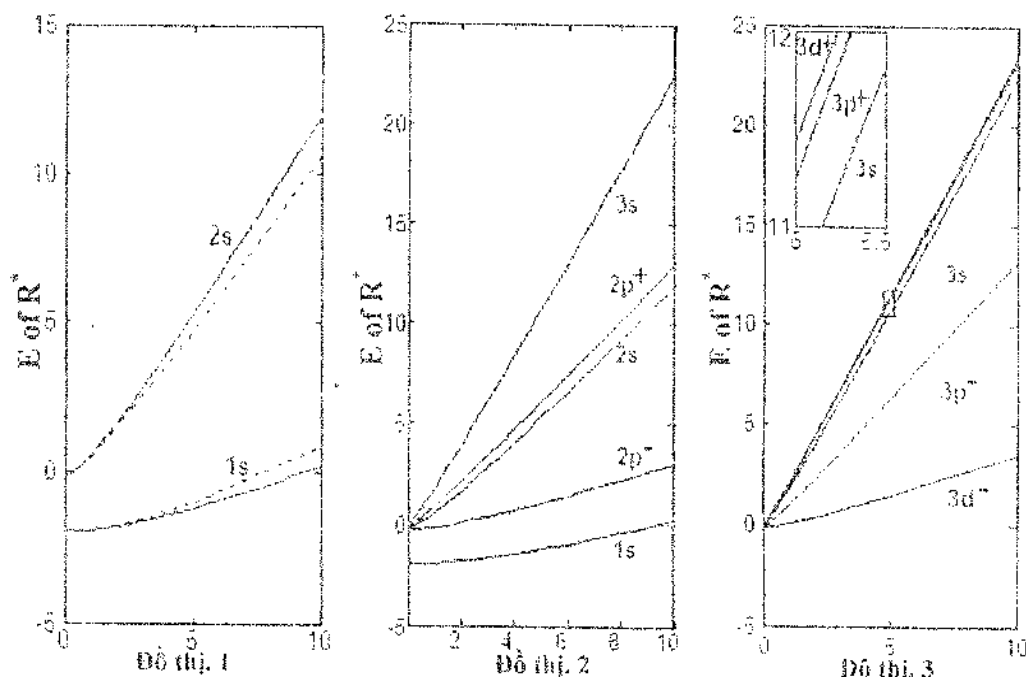
Các kết quả bằng số được đưa ra qua bảng 1, bảng 2 cho trường hợp không có thế màn chắn ( $\lambda = 0$ ) nhằm mục đích minh họa phương pháp. Các giá trị bằng số này cũng được minh họa qua các đồ thị tương ứng. Các kết quả bằng số đầy đủ hơn cho trường hợp có thế màn chắn sẽ được công bố trên tạp chí Journal of Physics B: At. Mol. Opt. 2005. Một phần kết quả của công trình được báo cáo tại Hội nghị vật lý lý thuyết toàn quốc lần thứ 29 (Thành phố Hồ Chí Minh, 16-18 tháng 8 năm 2004) [16].

**Bảng 1:** So sánh năng lượng gần đúng bậc hai OM với giá trị chính xác

$\gamma$	1s		2s	
	$E^{(0)} + \Delta E^{(2)}$	$E^T$	$E^{(0)} + \Delta E^{(2)}$	$E^T$
0.1	-1.999531227300	-1.999531492082	-0.189425392478	-0.205286888607
0.5	-1.988270414800	-1.988425281714	0.040830382398	0.040317408544
1.0	-1.953113823263	-1.955159683247	0.457376245815	0.494679638837
2.0	-1.816655524914	-1.836207439051	1.428479429477	1.576895542024
5.0	-1.042926239466	-1.226356637452	4.718418831904	5.271097760845
10	0.829712394045	0.184843852730	10.628237966548	11.883586469278

**Bảng 2:** Năng lượng chính xác tính bằng OM

$\gamma$	3s	3p+	3p-	3d+	3d-
0.10	0.001634680897	0.043576080008	-0.056423919992	0.071795722015	-0.128204277985
0.50	0.676770387524	0.828653444114	0.328653444114	0.892438209302	-0.107561798698
1.00	1.676970710757	1.918103969141	0.918103969141	2.005694128790	0.005694128790
2.00	3.828388290161	4.191127807757	2.191127807756	4.311633609260	0.311633609260
5.00	10.651147510593	11.240695516090	6.240695516090	11.425895187055	1.425895187055
10.00	22.39839272371	23.232965535868	13.232965535869	23.490841925399	3.490841925399



Đồ thị 1 So sánh phụ thuộc mức năng lượng vào cường độ từ trường (thường chấm chỉ kết quả gần đúng bậc hai OM) với kết quả chính xác.

Đồ thị 2 Phụ thuộc năng lượng chính xác của các trạng thái 1s, 2s, 2p<sup>+</sup>, 2p<sup>-</sup> và 3s vào cường độ từ trường.

Đồ thị 3 Phụ thuộc năng lượng chính xác của các trạng thái 3s, 3p<sup>+</sup>, 3p<sup>-</sup>, 3d<sup>-</sup> và 3d vào cường độ từ trường.

#### 4. KẾT LUẬN

Như vậy, phương pháp đưa ra trong công trình này cho phép ta đã thu được lời giải chính xác cho bài toán trạng thái lỗ trống dạng hydro trong từ trường với cường độ bất kỳ có tính đến thể màn chắn. Điều đáng kể là kết quả đưa ra không những là số liệu chính xác của các mức năng lượng mà còn là hàm sóng chính xác cho bài toán dưới dạng (25) cho phép sử dụng thuận luy phương pháp đại số trong tính toán các đặc trưng của hệ. Cần nhấn mạnh rằng khi tính toán các mức năng lượng kích thích bậc cao chúng ta không nhất thiết phải sử dụng điều kiện (22) hoặc (23) để xác định  $\omega$  mà đơn giản có thể chọn bằng phương pháp thử sao cho quá trình tính toán có tốc độ hội tụ cao nhất.

Công trình này được thực hiện trong phạm vi đề tài cấp cơ sở CS.2004.23.59 ĐH SP Tp.HCM.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Dzubenko A B. Charged hydrogenic problem in a magnetic field: Noncommutative translations, unitary transformations, and coherent states // *Phys Rev. B*, 2001.Vol 65.p.035318.
2. Zudov M.A., Du R.R., Simmons J.A., Reno J L. *Phys.Rev.Lett B*. 2003, Vol.90, p.46807. Zudov M A. On the phase of oscillatory microwave photoresistance and zero-resistance states // *arXiv:cond-mat/0306508* . Vol.1, 2003.p.1-5.
3. Studenikin S A, Potemski M, Coleridge P T, Sachrajda A, Wasilewski Z R. Microwave radiation induced magneto-oscillations in the longitudinal and transverse resistance of a two dimensional electron gas // *arXiv:cond-mat/0310347*. Vol.1, 2003.p.1-4.
4. Zhu J L, Wu J, Fu R T, Chen H, Kawazoe Y. // *Phys Rev.B*. 1997.Vol 55.p.1672.
5. Pino R., Villalba V M. Scales Variational Computation of the Energy Spectrum of a Two-dimensional Hydrogenic Donor in a Magnetic Field of Arbitrary Strength // *Phys. Stat. Sol.* (6) 1999, Vol 211, p. 641-649.
6. Victor M Villalba, Ramiro Pino. Energy spectrum of a two-dimensional screened donor in a constant magnetic field of arbitrary strength // *Physica B*. 2002,Vol 315.p.289-296.
7. MacDonald A H and Ritchie D S. Hydrogenic energy levels in two dimensions at arbitrary magnetic fields // *Phys. Rev. B*. 1986. Vol 33. p.8336-8344.
8. Le Van Hoang, Le Tran The Duy, Le Thi Ngoc Anh. Operator Method for Description of two-dimensional hydrogenic donor states in a magnetic field. // *Proc. Acad. Sci. Belarus, Phys. Math. ser.* 2005, No2 (đã nhận đăng).
9. Feranchuk I D, Komarov L I The Operator method of approximate solution of the Schrodinger equation // *Phys.Lett.A* 1982. Vol.88, p.212-214.
10. Feranchuk I D, Komarov L. I, Nichipor I V, Ulyanenkov A P. Operator Method in the problem of Quantum Anharmonic Oscillator // *Ann.Phys.*1995.Vol 238.p.370-440.
11. Kittel C. *Introduction to Solid State Physics*.-J Wiley & sons, New York, 1996.
12. Le Van Hoang, Nguyen Thu Giang. The Algebraic method for two-dimensional quantum atomic systems // *J.Phys.A: Math.Gen.*,1993,Vol.26.p.1409-1418.
13. Levi-Civita T. Sur la resolution qualitative du problem restraint des trois corps. // *Opere Matematiche*, 1956, Vol. 2, p. 1901-1907.
14. Korn G A, Korn T M. *Mathematical Handbook for scientists and engineers*. // McGraw-Hill: 1968.
15. Hoang Quoc Khanh, Le Van Hoang, Komarov L. I . Convergence of the operator method and the free constant choice problem. // *Proc. Acad. Sci. Belarus, Phys.Math. ser.* 1997, No3, p.71-75.
16. Hoang Do Ngoc Tram, Ngo Dinh Nguyen Thach, Le Thi Ngoc Anh, Le Tran The Duy and Le Van Hoang. Exact solution of two dimensional screened donor states in a magnetic field // *Proc. "29-th National Conf. on Theor. Phys."* (HCMC 16-18 August 2004). Hanoi: 2004, p.13.

**Abstract:**

**The operator method for electronic interactive problem – the hole of the two-dimensional electron gas with the existence of the screened magnetic field**

The use of Levi-Civita transformation allows us to formulate the problem of two-dimensional screened donor states in a magnetic field as that of two-dimensional anharmonic oscillator. Therefore, the operator method can be directly used and the exact solutions of Schrödinger equation for the above-mentioned problem are obtained. In our approach, wave functions are constructed in the representation of annihilation and creation operators that permits one to use pure algebraic method in further calculations of other characteristics.