

MÔ TẢ GIẢI TÍCH CHO NĂNG LƯỢNG TRẠNG THÁI CƠ BẢN CỦA EXCITON HAI CHIỀU TRONG TỪ TRƯỜNG

NGUYỄN PHƯƠNG DUY ANH*, HOÀNG ĐỖ NGỌC TRÂM**

TÓM TẮT

Biểu thức giải tích mô tả tường minh sự phụ thuộc của năng lượng vào cường độ từ trường được xây dựng cho trạng thái cơ bản của exciton hai chiều trong từ trường. Điểm đặc biệt của biểu thức thu được là độ chính xác rất cao với sai số chưa đến 1% cho toàn miền biến đổi của từ trường.

Từ khóa: mô tả giải tích, exciton hai chiều, năng lượng, trạng thái cơ bản, phương pháp toán tử FK.

ABSTRACT

An analytical description for the ground state energy of two dimensional exciton in a magnetic field

The article presents an analytical expression describing the dependence of the ground state energy on magnetic field intensity for a two-dimensional exciton in a magnetic field. The special feature of the obtained expression is its very high accuracy with error less than 1% for the whole range of the magnetic field intensity.

Keywords: analytical description, two-dimensional exciton, ground state energy, FK operator method.

1. Mở đầu

Exciton hai chiều trong từ trường là một bài toán kinh điển được nghiên cứu nhiều do tầm quan trọng trong vật lý hệ thấp chiều [3]. Bài toán này cũng là mô hình để kiểm tra tính hiệu quả của các phương pháp giải phương trình Schrödinger khác nhau [2, 6, 8]. Trong công trình mới đây [7], nghiệm giải tích gần đúng của phương trình Schrödinger cho exciton hai chiều trong từ trường được tính bằng phương pháp toán tử FK (FK-OM) [4-5]. Nghiệm giải tích này có độ chính xác với sai số dưới 1% trong toàn miền thay đổi của từ trường. Tuy nhiên, sự phụ thuộc của năng lượng $E(\chi)$ vào cường độ từ trường $\gamma(\chi)$ phải thông qua một tham số trung gian χ làm hạn chế tính ứng dụng của nó trong các phân tích giải tích. Chính vì vậy, việc xác định sự phụ thuộc của năng lượng vào từ trường bằng biểu thức giải tích tường minh $E(\gamma)$ là bài toán cần giải quyết.

Trong công trình này, nghiệm giải tích gián tiếp $E(\chi)$ trong công trình [7] sẽ được sử dụng để xây dựng nghiệm giải tích trực tiếp $E(\gamma)$. Trước tiên ta sẽ khảo sát sự

*ThS, Trường Đại học Thủ Dầu Một, Bình Dương

**TS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

phụ thuộc $\gamma(\chi)$ để hiểu rõ quy luật biến thiên của từ trường theo tham số χ . Điều này cho phép ta khai triển $E(\chi)$ theo chuỗi của γ trong vùng $\gamma \ll 1$ và vùng $\gamma \gg 1$. Nếu chọn được bậc khai triển sao cho hai biểu thức năng lượng trong hai miền tiệm cận của từ trường có sự bao phủ lẫn nhau trong miền từ trường trung bình, ta có thể kết luận là đã tìm ra biểu thức giải tích trực tiếp của năng lượng. Ta sẽ so sánh kết quả thu được với năng lượng giải tích thu được bằng phương pháp lí thuyết nhiễu loạn (perturbation theory method) trong vùng từ trường yếu và khai triển ngược hệ số tương tác lớn (strong coupling series) trong vùng từ trường mạnh.

2. Nghiệm giải tích bằng phương pháp toán tử FK

Trước tiên ta nhắc lại nghiệm giải tích gián tiếp thu được trong công trình [7] và các ý tưởng chính để thu được nó. Bằng cách đưa vào phương trình Schrödinger thành phần tiệm cận trong miền từ trường mạnh $\exp[-(x^2 + y^2)/\chi]$ và sử dụng FK-OM, trong công trình [7] thu được biểu thức cho năng lượng trạng thái cơ bản :

$$\begin{aligned}
 E(\chi) = & \left[128\chi^2(1+\chi)^2 - 16\chi^2(42+73\chi+31\chi^2)I(\chi) \right. \\
 & + 4\chi(-24+274\chi+473\chi^2+180\chi^3)I^2(\chi) \\
 & - 4\chi(-99+108\chi+314\chi^2+116\chi^3)I^3(\chi) \\
 & + (18-483\chi-360\chi^2+228\chi^3+112\chi^4)I^4(\chi) \\
 & \left. + 6(-9+24\chi+40\chi^2+8\chi^3)I^5(\chi) + 36(1+\chi)I^6(\chi) \right] \times \\
 & \times \left[2\chi(2(-2+\chi)\chi + (7-4\chi)\chi I(\chi) + (1-5\chi+2\chi^2)I^2(\chi) + 2\chi I^3(\chi)) \right]^{-1},
 \end{aligned} \tag{1}$$

trong đó: χ là tham số đặc trưng của FK-OM. Cùng với biểu thức (1), biểu thức của cường độ từ trường cũng được tìm thấy như một hàm phụ thuộc vào tham số χ như sau:

$$\begin{aligned}
 \frac{\gamma^2}{4} = & \frac{8\chi - 14\chi I(\chi) + (-3+6\chi)I^2(\chi) + 2I^3(\chi)}{\chi^2 \left[2(-2+\chi)\chi + (7-4\chi)\chi I(\chi) + (1-5\chi+2\chi^2)I^2(\chi) + 2\chi I^3(\chi) \right]^4} \\
 & \times 4 \left[8\chi(1+\chi) - 2\chi(13+8\chi)I(\chi) + (-3+18\chi+8\chi^2)I^2(\chi) + 6I^3(\chi) \right]^3.
 \end{aligned} \tag{2}$$

Trong (1) và (2), hàm số $I(\chi)$ được định nghĩa

$$I(\chi) = \frac{2\chi}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} d\tau \frac{e^{-\tau^2}}{\chi + \tau^2} = \sqrt{\pi\chi} e^{\chi} \operatorname{erfc}(\sqrt{\chi}), \tag{3}$$

trong đó: $\operatorname{erfc}(x)$ là hàm tích phân sai số [1]. Về nguyên tắc, từ (2) ta có thể thu được $\chi(\gamma)$ bằng cách giải số, sau đó đem thế vào (1) để có sự phụ thuộc $E(\gamma)$. Như vậy, ta có thể xem (1) và (2) là biểu thức giải tích gián tiếp qua tham số χ cho năng

lượng của exciton hai chiều trong từ trường. Kết quả này theo phân tích số trong công trình [7] cho thấy có độ chính xác rất cao với sai số dưới 1%.

3. Biểu thức giải tích cho năng lượng

Khảo sát biểu thức (2) ta thấy có sự phụ thuộc nghịch đảo giữa từ trường γ và tham số χ , nghĩa là $\gamma \rightarrow 0$ khi $\chi \rightarrow +\infty$ và ngược lại $\gamma \rightarrow +\infty$ khi $\chi \rightarrow 0$. Dựa vào đây, ta khai triển γ theo $\chi \gg 1$ cho trường hợp từ trường yếu $\gamma \ll 1$ và sử dụng phương pháp lặp để thu được $\chi(\gamma)$. Sau khi thế vào (1), ta thu được:

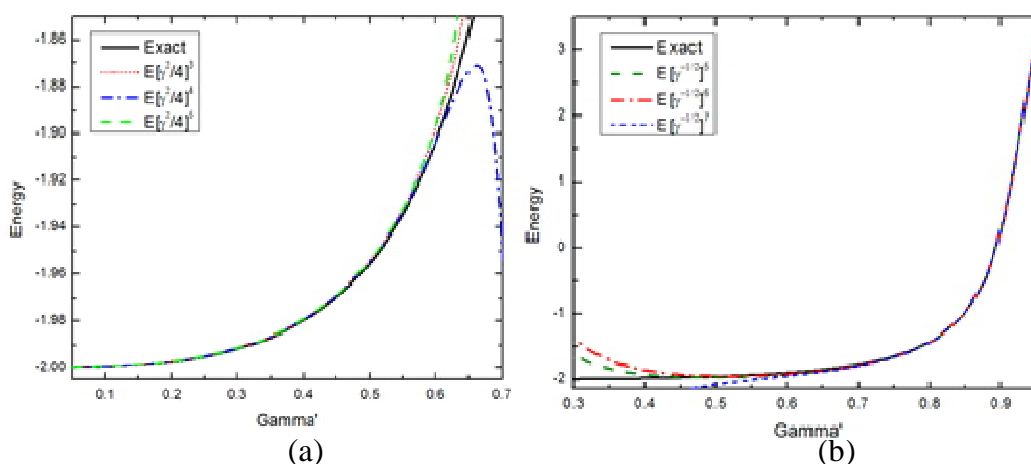
$$E_{weak\ field}(\gamma) = -2 + 0.3750 \times [\gamma^2 / 8] - 0.149414 \times [\gamma^2 / 8]^2 + 0.228656 \times [\gamma^2 / 8]^3 - 0.578432 \times [\gamma^2 / 8]^4 + O[\gamma^2 / 8]^5. \quad (4)$$

Ta thấy biểu thức khai triển (4) sẽ còn có ý nghĩa khi $\gamma^2 / 8 < 1$, nghĩa là có thể áp dụng trong vùng từ trường $\gamma < 2.82$. Tương tự, ta thu được biểu thức năng lượng cho vùng từ trường mạnh $\gamma \gg 1$:

$$E_{strong\ field}(\gamma) = 0.5\gamma - 1.2533\sqrt{\gamma} - 0.6883 - 0.65443\frac{1}{\sqrt{2\gamma}} - 0.36998\frac{1}{2\gamma} + 0.032131\frac{1}{(2\gamma)^{3/2}} + 0.239244\frac{1}{(2\gamma)^2} + 0.270296\frac{1}{(2\gamma)^{5/2}} + 0.147904\frac{1}{(2\gamma)^3} + O[(2\gamma)^{-7/2}]. \quad (5)$$

Biểu thức (5) có ý nghĩa khi $2\gamma > 1$, tức vùng áp dụng là $\gamma > 0.5$.

Như vậy công thức (4) có thể sử dụng cho $\gamma < 2.82$ trong khi công thức (5) sử dụng cho $\gamma > 0.5$. Kết hợp hai công thức (4) và (5), miền áp dụng khi đó là toàn bộ các giá trị của từ trường γ . Hình 1a biểu diễn năng lượng thu được theo công thức (4) cho từ trường yếu (các đường đứt đoạn). So với năng lượng chính xác thu được trong công trình [6] bằng FK-OM (đường liền nét) thì đường biểu diễn (4) với khai triển đến γ^8 tương thích khá tốt đến giá trị $\gamma' \leq 0.6$. Các khai triển cao hơn không còn ảnh hưởng đến độ chính xác, do đó trong công thức (4) ta chỉ giữ lại các thành phần khai triển đến γ^8 . Ở đây trên Hình 1 để dễ phân biệt các đường, ta sử dụng $\gamma' = \gamma / (\gamma + 1)$, tức $\gamma' \leq 0.6$ tương ứng với $\gamma \leq 1.5$. Hình 1b biểu diễn năng lượng thu được theo công thức (5) cho từ trường mạnh (các đường đứt nét). So sánh với đường năng lượng chính xác (đường liền nét) ta thấy có sự tương thích khá tốt với các giá trị $\gamma' \geq 0.6$, tương ứng với $\gamma \geq 1.5$. Các khai triển đến γ^{-6} đủ để thu được kết quả với sai số nhỏ hơn 1%, vì vậy trong công thức (5) ta chỉ giữ các số hạng đến khai triển này.



Hình 1. Năng lượng trạng thái cơ bản của exciton hai chiều theo biểu thức giải tích (đường đứt nét) trong miền từ trường yếu (a) và trong miền từ trường mạnh (b) so sánh với giá trị chính xác (đường liền nét). Ta sử dụng từ trường hiệu dụng $\gamma' = \gamma / (\gamma + 1)$.

Như vậy sử dụng đồng thời công thức (4) cho $\gamma \leq 1.5$ và công thức (5) cho $\gamma \geq 1.5$, ta thu được biểu thức giải tích $E(\gamma)$ với độ chính xác cao có sai số chưa đến 1% cho toàn miền thay đổi từ trường. Để so sánh, chúng tôi sử dụng phương pháp nhiễu loạn cho vùng từ trường yếu và khai triển ngược hằng số tương tác cho vùng từ trường mạnh để giải phương trình Schrödinger. Kết quả cũng có được năng lượng dưới dạng khai triển theo từ trường như công thức (4) và (5) nhưng chỉ trùng hai số hạng ban đầu. Phân tích số cho thấy công thức của lý thuyết nhiễu loạn chỉ đúng (sai số dưới 1%) cho các giá trị từ trường $\gamma \leq 1.2$ và công thức của khai triển ngược hệ số tương tác chỉ đúng với các giá trị từ trường $\gamma \geq 4.0$. Như vậy biểu thức giải tích thu được từ FK-OM mới phủ hết toàn miền thay đổi từ trường.

4. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi thu được hai biểu thức giải tích cho năng lượng trạng thái cơ bản của exciton hai chiều trong từ trường cho miền từ trường yếu và miền từ trường mạnh. Điều đặc biệt là hai miền từ trường yếu và mạnh trong khai triển giao nhau tại một giá trị $\gamma_c = 1.5$, do đó nó bao phủ toàn miền thay đổi từ trường. Biểu thức thu được có độ chính xác cao với sai số dưới 1% cho toàn miền thay đổi từ trường. Kết quả này trùng với kết quả của lý thuyết nhiễu loạn cho vùng từ trường yếu $\gamma \leq 1.2$ và của phương pháp khai triển ngược hệ số tương tác cho vùng từ trường mạnh $\gamma \geq 4.0$. Việc xác định được nghiệm giải tích chính xác cao trong miền trung bình của từ trường là ưu thế của FK-OM. Đây là một kết quả có ý nghĩa do đây là vùng được sử dụng nhiều trong thực nghiệm nhưng cũng là vùng mà phương pháp lý thuyết nhiễu loạn không áp dụng được. Các phân tích tương tự cũng sẽ được tiến hành cho các trạng thái kích thích trong công trình mở rộng tiếp theo.

Ghi chú: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ phát triển khoa học và công nghệ quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 103.01-2013.38 và bởi Trường Đại học Sư phạm TP HCM trong đề tài cấp cơ sở mã số CS.2013.19.42.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Abramowitz M. and Stegun I. A. (1972), *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, 10th ed., Washinton D.C., pp. 295-330.
2. Bruno-Alfonso A., Candido L. and Hai G. Q. (2010), “Two-dimensional electron states bound to an off-plane donor in a magnetic field”, *J. Phys.: Cond. Matt.* **22**, pp. 125801.
3. Ding B. and Alameh K. (2014), “Simultaneous monitoring of singlet and triplet exciton variations in solid organic semiconductors driven by an external static magnetic field”, *Appl. Phys. Lett.* **105**, pp. 013304.
4. Feranchuk I. D. and Komarov L. I. (1982), “The operator method of approximate solution of the Schrödinger equation”, *Phys. Lett. A* **88**, pp. 212-214.
5. Feranchuk I. D., Ivanov A., Le Van-Hoang, Ulyanhenkov A. (2015), *Non-Perturbative Description of Quantum Systems*, Springer – Switzerland.
6. Hoang-Do Ngoc-Tram, Pham Dang-Lan and Le Van-Hoang (2013), *Physica B* **423**, pp. 31-37.
7. Hoang-Do Ngoc-Tram, Hoang Van-Hung and Le Van-Hoang (2013), *J. Math. Phys.* **54**, pp. 052105.
8. Schönhöbel A.M., Girón-Sedas J.A. and Porrás-Montenegro N. (2014), “Quasistationary states in single and double GaAs-(Ga,Al)As quantum wells: Applied electric field and hydrostatic pressure effects”, *Physica B* **442**, pp. 74–80.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 10-12-2014; ngày phản biện đánh giá: 15-12-2014;
ngày chấp nhận đăng: 12-02-2015)