

Bài báo nghiên cứu

LÍ THUYẾT NHIỀU LOẠN CÓ ĐIỀU TIẾT CHO NĂNG LƯỢNG
EXCITON TRUNG HÒA TRONG TỪ TRƯỜNG ĐỀULý Duy Nhất^{1*}, Huỳnh Nguyễn Thanh Trúc², Nguyễn Lục Hoàng Minh¹,Nguyễn Nhật Quang¹, Đoàn Phước Thiện¹, Phan Ngọc Hưng¹¹Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam²Trường THPT Marie Curie, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam*Tác giả liên hệ: Lý Duy Nhất – Email: nhatld@hcmue.edu.vn

Ngày nhận bài: 08-02-2022; ngày nhận bài sửa: 22-3-2022; ngày duyệt đăng: 25-3-2022

TÓM TẮT

Exciton hai chiều trong từ trường là bài toán quan trọng cho việc trích xuất các thông tin cấu trúc vật liệu đơn lớp TMD (Transition Metal Dichalcogenides). Gần đây, phương pháp toán tử FK (Feranchuk-Komarov) được sử dụng thành công để tính số phổ năng lượng cho hệ này. Trong công trình này, lý thuyết nhiễu loạn với sự điều tiết bằng tham số tự do được sử dụng để tính năng lượng của exciton trong từ trường với thể Keldysh. Trước tiên, chúng tôi trình bày tổng quát lại lý thuyết nhiễu loạn. Sau đó, sự hội tụ của nghiệm nhiễu loạn bậc cao được nghiên cứu với từ trường lên tới 120 Tesla. Các tính toán số được trình bày cho trạng thái cơ bản, nhưng các biểu thức tổng quát cho phép tính cho các trạng thái kích thích. Kết quả có độ chính xác đến nhiễu loạn bậc hai rất cao, sai số dưới 1% cho phép nghiên cứu tiếp vấn đề để có lời giải giải tích tường minh.

Từ khóa: toán tử sinh hủy; bộ hàm cơ sở; phương pháp toán tử FK; exciton; thể màn chắn; hệ nguyên tử hai chiều

1. Giới thiệu

Phổ năng lượng của exciton trong đơn lớp TMD (Transition metal dichalcogenide) là bài toán quan trọng trong các khảo sát các hiệu ứng lượng tử, quang học và vật lý bán dẫn và được khảo sát từ những năm 30, 60 và 70 (Frenkel, 1931; Keldysh, 1979; Rytova, 1967; Wannier, 1937) cho tới ngày nay (Chernikov et al., 2014; Goryca et al., 2019; McDonnell, Viner, Rivera, Xu, & Smith, 2020; Nguyen, Ly, Le, Hoang, & Le, 2019; Raja et al., 2017; Stier et al., 2018). Bằng cách so sánh phổ năng lượng exciton của lý thuyết và thực nghiệm ta có thể trích xuất được thông tin cấu trúc đơn lớp TMD như hằng số điện môi trung bình, chiều dài chắn và khối lượng rút gọn của đơn lớp TMD. Ý tưởng này lần đầu tiên khởi xướng vào năm 2014 bởi Chernikov công trình (Chernikov et al., 2014) để trích xuất chiều

Cite this article as: Ly Duy Nhat, Huynh Nguyen Thanh Truc, Nguyen Luc Hoang Minh, Nguyen Nhat Quang, Doan Phuoc Thien, & Phan Ngoc Hung (2022). Regulated perturbation theory for neutral exciton energy in a uniform magnetic field. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 19(3), 399-410.

dài chắn và ý tưởng này được tiếp tục áp dụng cho những công trình 2018, 2019 khi dựa trên phổ năng lượng exciton trong từ trường để trích xuất chiều dài chắn, hệ số điện môi và hệ số nghịch từ (Goryca et al., 2019; Stier et al., 2018). Tuy nhiên, trong các công trình này, để trích xuất thông tin khối lượng rút gọn, các tác giả sử dụng công thức năng lượng phụ thuộc tuyến tính vào từ trường. Nên nghiên cứu một biểu thức giải tích phù hợp hơn cho vùng từ trường dưới 90 Tesla để sử dụng trong các thực nghiệm là cần thiết.

Cũng trong năm 2019, chúng tôi đã áp dụng phương pháp toán tử FK (Feranchuk, Ivanov, Le, & Ulyanenko, 2015) để trích xuất chiều dài chắn và khối lượng rút gọn của đơn lớp TMD của chất WSe₂ (Nguyen et al., 2019). Phổ năng lượng thu được trong công trình này hội tụ đến 12 chữ số thập phân cho mức lượng tử s. Việc giải số phổ năng lượng này dựa trên mô hình giải chính xác phương trình trị riêng, véc-tơ riêng cho phép chúng tôi sử dụng lại code FORTRAN đăng trên Tạp chí Computer Physics Communications năm 2019 (Cao, Ly, Hoang, & Le, 2019). Tuy nhiên để có được biểu thức mô tả tường minh sự phụ thuộc của năng lượng exciton vào từ trường thì cách giải số trên không thể sử dụng được. Từ đây đã gợi ý cho chúng tôi thực hiện nghiên cứu này với mục tiêu nghiên cứu tính hội tụ cũng như độ chính xác của bổ chính bậc thấp trong lý thuyết nhiễu loạn.

Trong nghiên cứu này, trước tiên chúng tôi sẽ trình bày một cách hệ thống mô hình lý thuyết nhiễu loạn khi áp dụng cách điều tiết tốc độ hội tụ bằng tham số tự do đưa ra trong phương pháp toán tử FK. Sau đó chúng tôi khảo sát tính hội tụ của mô hình này và áp dụng để tìm năng lượng mức cơ bản của exciton trong từ trường đều có cường độ lên đến 120 Tesla, gấp đôi từ trường trong phòng thí nghiệm hiện nay (Stier et al., 2018). Chúng tôi cũng so sánh kết quả thu được với mô hình giải chính xác phương trình trị riêng, véc-tơ riêng và đánh giá vai trò điều tiết của tham số tự do để có được nghiệm hội tụ. Ngoài ra chúng tôi cũng đánh giá độ chính xác của bổ chính đến bậc hai để có thể sử dụng biểu thức giải tích năng lượng cho các bài toán vật lý tiếp theo.

2. Lý thuyết nhiễu loạn có điều tiết

2.1. Phương trình Schrödinger

Trước tiên, chúng tôi viết phương trình Schrödinger cho exciton trung hòa đặt trong từ trường trong hệ đơn vị nguyên tử (Hartree atomic units) có đơn vị chiều dài là bán kính Bohr hiệu dụng $a_0^* = 4\pi\epsilon_0\hbar^2 / \mu e^2$, $\mu = m_h m_e / (m_h + m_e)$ là khối lượng rút gọn, đơn vị năng lượng là Hartree hiệu dụng $E_h^* = \mu e^4 / 16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2$ và đơn vị từ trường là $B_0 = \mu E_h^* / e\hbar$. Phương trình có dạng như sau:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\gamma^2}{8} (x^2 + y^2) + V_{h-e}(r) + \frac{m\alpha_{ex}\gamma}{2} - E \right\} \psi(x, y) = 0, \quad (1)$$

trong đó, bán kính $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ là trị riêng của toán tử moment động lượng

$$\hat{l}_z = -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (2)$$

tham số $\alpha_{\text{ex}} = (m_h - m_e) / (m_h + m_e)$. Khối lượng hiệu dụng của lỗ trống m_h và electron m_e được ước lượng trong Bảng 1 công trình (Kylänpää & Komsa, 2015). Thế năng tương tác $V_{h-e}(r)$ giữa electron và lỗ trống trong đơn lớp TMD có dạng thế Keldysh (Keldysh, 1979) được mô tả thông qua hàm Struve và Bessel bậc không

$$V_K(r, r_0, \kappa) = -\frac{\pi}{2r_0} \left[H_0\left(\frac{\kappa r}{r_0}\right) - Y_0\left(\frac{\kappa r}{r_0}\right) \right]. \quad (3)$$

Ở đây, κ là hằng số điện môi trung bình, r_0 là độ dài chắn có liên quan tới độ phân cực χ_{2D} của đơn lớp TMD, $r_0 = 2\pi\chi_{2D}$. Chi tiết về phương trình này có thể tham khảo trong công trình (Nguyen et al., 2019).

Bây giờ chúng tôi sử dụng phép biến đổi Levi-Civita (Levi-Civita, 1956)

$$x = u^2 - v^2, \quad y = 2uv \quad (4)$$

để chuyển phương trình Schrödinger (1) về dạng dao động tử phi điều hòa hai chiều. Bước chuyển này đã được thực hiện ở các công trình trước đây (Hoang-Do, Hoang, & Le, 2013; Hoang-Do, Pham, & Le, 2013; Nguyen et al., 2019) do vậy trong bài này, không trình bày lại tính toán. Kết quả cuối cùng thu được phương trình Schrödinger trong không gian (u, v) như sau

$$\left\{ -\frac{1}{8} \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right) - \left(E - \frac{1}{2} m \alpha_{\text{ex}} \gamma \right) (u^2 + v^2) + \frac{\gamma^2}{8} (u^2 + v^2)^3 + (u^2 + v^2) V_K(u, v) \right\} \psi(u, v) = 0. \quad (5)$$

Bài toán dao động tử phi điều hòa rất thuận tiện tính toán bằng phương pháp đại số qua biểu diễn toán tử sinh hủy, được định nghĩa như sau:

$$\hat{\alpha} = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(u + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial u} \right), \quad \hat{\alpha}^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(u - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial u} \right), \quad \hat{\beta} = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(v + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial v} \right), \quad \hat{\beta}^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(v - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial v} \right). \quad (6)$$

Chú ý là trong các giáo trình cơ lượng tử, người ta sử dụng tần số góc của dao động tử điều hòa trong định nghĩa toán tử sinh, hủy, nghĩa là người ta chọn cố định: $\omega = \sqrt{-8E + 4m\alpha_{\text{ex}}\gamma}$. Khi đó, thành phần dao động điều hòa sẽ là phần chính và thành phần phi điều hòa sẽ là nhiễu loạn. Phương pháp toán tử trình bày trong chuyên khảo (Feranchuk et al., 2015) có ý tưởng là xem ω như một tham số tự do giúp điều chỉnh tốc độ hội tụ của bài toán. Điều này đã được thảo luận trong chuyên khảo và được nhắc lại trong công trình (Nguyen et al., 2019).

Trong bài toán này, đề tận dụng tính chất bảo toàn của moment động lượng, toán tử sinh, hủy mới được định nghĩa thông qua các toán tử ở (6) như sau:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha} - i\hat{\beta}), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha} + i\hat{\beta}), \quad \hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha} + i\hat{\beta}), \quad \hat{b}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha} - i\hat{\beta}). \quad (7)$$

Các toán tử sinh, hủy mới thỏa mãn các tính chất giao hoán

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = [\hat{b}, \hat{b}^+] = 1, \quad [\hat{a}, \hat{b}] = [\hat{a}^+, \hat{a}^+] = [\hat{b}, \hat{b}] = [\hat{b}^+, \hat{b}^+] = 0. \quad (8)$$

Lúc này, toán tử moment động lượng chỉ chứa các toán tử trung hòa $\hat{n}_a = \hat{a}^+ \hat{a}$ và $\hat{n}_b = \hat{b}^+ \hat{b}$

$$\hat{L} = \frac{1}{2}(\hat{a}^+ \hat{a} - \hat{b}^+ \hat{b}). \quad (9)$$

Phương trình (5) được viết lại dạng đại số như sau

$$\hat{H}|\psi\rangle = \tilde{E} \hat{R}|\psi\rangle, \quad (10)$$

trong đó, $\tilde{E} = E - m\alpha_{\text{ex}}\gamma/2$ và các toán tử $\hat{H}$, $\hat{R}$ được biểu diễn qua các toán tử sinh, hủy

$$\begin{aligned} \hat{R} &= \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b} + 1 + \hat{a} \hat{b} + \hat{a}^+ \hat{b}^+, \\ \hat{H} &= \frac{\omega^2}{8}(\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b} + 1 - \hat{a} \hat{b} - \hat{a}^+ \hat{b}^+) + \frac{\gamma^2}{8\omega^2} \hat{R}^3 - \omega \hat{V}_K. \end{aligned} \quad (11)$$

Trong biểu thức (11), toán tử $\hat{V}_K$ mô tả thế chắn Keldysh được viết ở dạng tích phân

$$\hat{V}_K = -\frac{1}{\kappa} \int_0^\infty \frac{dq}{\sqrt{1 + \omega^2 r_0^2 q^2 / \kappa^2}} e^{-q\hat{R}} \hat{R}. \quad (12)$$

Để áp dụng mô hình lí thuyết nhiễu loạn, trong phương trình (10) chúng tôi tách Hamiltonian $\hat{H}$ và toán tử bán kính $\hat{R}$ lần lượt thành hai phần. Một phần chứa toán tử trung hòa $\hat{H}_0$, $\hat{R}_0$. Đây là các toán tử có các yếu tố ma trận nằm trên đường chéo chính khác 0 và yếu tố ma trận khác bằng 0. Phần thứ hai là phần nhiễu loạn $\hat{V}$, $\hat{S}$ chứa các toán tử không trung hòa nên thành phần trên đường chéo chính bằng 0. Ví dụ, ta tách toán tử $\hat{R} = \hat{R}_0 + \hat{S}$, trong đó $\hat{R}_0$ chỉ chứa toán tử trung hòa

$$\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b} + 1, \quad (13)$$

và $\hat{S}$ chứa các toán tử không trung hòa

$$\hat{S} = \hat{M} + \hat{M}^+; \quad \hat{M} = \hat{a} \hat{b}, \quad \hat{M}^+ = \hat{a}^+ \hat{b}^+. \quad (14)$$

Cuối cùng chúng tôi viết lại dạng đại số của phương trình (10) thành

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = \tilde{E}(\hat{R}_0 + \hat{S})|\psi\rangle. \quad (15)$$

Phương trình (15) bắt nguồn từ phương trình (5) có dạng phương trình cho dao động tử phi điều hòa. Từ đây bộ hàm cơ sở dao động tử điều hòa hai chiều được sử dụng. Tận

dụng tính chất bảo toàn moment động lượng nên bộ hàm cơ sở hai chiều còn một chỉ số chạy n được viết lại ở dạng đại số

$$|n, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n+m)!(n-m)!}} (\hat{a}^+)^{n+m} (\hat{b}^+)^{n-m} |0(\omega)\rangle, \quad (16)$$

trong đó, $\hat{a}$, $\hat{a}^+$, $\hat{b}$, $\hat{b}^+$ là toán tử sinh, hủy mới được định nghĩa như trong (Nguyen et al., 2019) và được viết lại trong (7). Bộ hàm cơ sở (16) là trực giao và chuẩn hóa thỏa mãn các điều kiện

$$\langle n', m' | n, m \rangle = \delta_{n'n} \delta_{m'm}, \text{ và } \hat{a}|0(\omega)\rangle = \hat{b}|0(\omega)\rangle = 0.$$

2.2. Mô hình lý thuyết nhiễu loạn

Bây giờ, ta coi thành phần $\hat{V}$, $\hat{S}$ trong phương trình (15) là thành phần nhiễu loạn. Đầu tiên ta viết $\hat{V} \rightarrow \beta \hat{V}$, và $\hat{S} \rightarrow \beta \hat{S}$, ở đây β là tham số hình thức để xác định bậc nhiễu loạn và sẽ bỏ đi sau khi xác định được các bổ chính năng lượng và hệ số hàm sóng. Ta viết lại phương trình Schrödinger (15) thành

$$(\hat{H}_0 + \beta \hat{V})|\psi\rangle = \tilde{E}(\hat{R}_0 + \beta \hat{S})|\psi\rangle. \quad (17)$$

Giải thuyết các trị riêng của $\hat{H}$ không suy biến và hệ hàm riêng $\{|i\rangle\}$ của $\hat{H}_0$ là đầy đủ và trực chuẩn thỏa mãn phương trình

$$\hat{H}_0 |n\rangle = \tilde{E}_n^{(0)} \hat{R}_0 |n\rangle. \quad (18)$$

Giải phương trình này sẽ tìm được năng lượng bậc 0 phụ thuộc vào tham số tự do ω và bình phương của cường độ từ trường γ

$$\tilde{E}_n^{(0)} = \frac{H_{nn}}{R_{nn}} = \frac{1}{8} \omega^2 + \frac{(V_K)_{nn}}{2n+1} + \frac{\gamma^2}{4\omega^2} (5n^2 + 5n - 3m^2 + 3), \quad (19)$$

trong đó, các yếu tố ma trận được xác định

$$X_{nk} = \langle n, m | \hat{X} | k, m \rangle.$$

Để tìm nghiệm bậc (s) của (17), trước tiên ta viết dạng khai triển của bộ hàm cơ sở (16)

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k |k\rangle. \quad (20)$$

Ta chú ý rằng tuy bài toán đang xét là hai chiều với hai chỉ số lượng tử nhưng do hệ có tính bảo toàn moment động lượng nên bộ hàm cơ sở được cố định bởi số lượng tử từ m và chỉ còn một chỉ số chạy trong khai triển hàm sóng bên trên. Thay (20) vào phương trình (17) ta thu được

$$\left(\hat{H}_0 + \beta \hat{V} \right) \left(|n\rangle + \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k |k\rangle \right) = \tilde{E}_n \left(\hat{R}_0 + \beta \hat{S} \right) \left(|n\rangle + \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k |k\rangle \right). \quad (21)$$

Tiếp theo, ta nhân trái $\langle n|$ cho hai vế (21) ta thu được

$$\tilde{E}_n^{(0)} R_{nn} + \beta \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k V_{nk} = \tilde{E}_n \left(R_{nn} + \beta \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k S_{nk} \right). \quad (22)$$

Tương tự ta nhân trái $\langle j|$, $j \neq n$ cho hai vế (21) ta cũng thu được

$$\tilde{E}_j^{(0)} C_j R_{jj} + \beta V_{jn} + \beta \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k V_{jk} = \tilde{E}_n \left(C_j R_{jj} + \beta S_{jn} + \beta \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k S_{jk} \right). \quad (23)$$

Sau đó, ta tìm năng lượng $\tilde{E}_n$ và hệ số khai triển C_j dưới dạng khai triển theo bậc nhiễu loạn (s)

$$\tilde{E}_n = \tilde{E}_n^{(0)} + \sum_{s=1}^{+\infty} \beta^s \Delta E_n^{(s)}, \quad C_j = \sum_{s=1}^{+\infty} \beta^s \Delta C_j^{(s)} \quad (j \neq n), \quad (24)$$

trong đó, $\tilde{E}_n^{(0)}$ là năng lượng bổ chính bậc 0 được xác định trong biểu thức (19) và hệ số khai triển bậc 0, $C_n^{(0)} = 1$.

Cuối cùng, ta lần lượt thay các biểu thức (24) vào hệ phương trình (22) và (23) để tìm các bổ chính năng lượng và hệ số khai triển hàm sóng.

Năng lượng bổ chính bậc (s). Để tìm năng lượng bổ chính ta thay (24) vào (22).

Khai triển và rút gọn ta được

$$\begin{aligned} \sum_{h=1}^{+\infty} \beta^{h+1} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} V_{nk} \Delta C_k^{(h)} &= E_n^{(0)} \sum_{t=1}^{+\infty} \beta^{t+1} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} S_{nk} \Delta C_k^{(t)} + R_{nn} \sum_{h=1}^{+\infty} \beta^h \Delta E_n^{(h)} \\ &+ \sum_{h=1}^{+\infty} \beta^h \Delta E_n^{(h)} \sum_{t=1}^{+\infty} \beta^{t+1} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} S_{nk} \Delta C_k^{(t)}. \end{aligned} \quad (25)$$

Xét bổ chính bậc 1, ta chỉ giữ lại các số hạng có chứa β^0, β và thu được $\Delta E_n^{(1)} = 0$.

Tiếp theo khi xét bổ chính bậc (s-1), ta chỉ giữ lại các số hạng có chứa từ $\beta^0 \rightarrow \beta^{s-1}$ và thu được

$$\begin{aligned} \sum_{h=1}^{s-2} \beta^{h+1} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} V_{nk} \Delta C_k^{(h)} &= E_n^{(0)} \sum_{t=1}^{s-2} \beta^{t+1} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} S_{nk} \Delta C_k^{(t)} + R_{nn} \sum_{h=1}^{s-1} \beta^h \Delta E_n^{(h)} \\ &+ \sum_{h=1}^{s-3} \beta^h \Delta E_n^{(h)} \sum_{t=1}^{s-2-h} \beta^{t+1} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} S_{nk} \Delta C_k^{(t)}. \end{aligned} \quad (26)$$

Tương tự xét bổ chính bậc (s) ta thu được

$$\begin{aligned}
 & \sum_{h=1}^{s-2} \beta^{h+1} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} V_{nk} \Delta C_k^{(h)} + \beta^s \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} V_{nk} \Delta C_k^{(s-1)} \\
 &= E_n^{(0)} \sum_{t=1}^{s-2} \beta^{t+1} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} S_{nk} \Delta C_k^{(t)} + \varepsilon_n \beta^s \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} S_{nk} \Delta C_k^{(s-1)} + R_{nn} \beta^s \Delta E_n^{(s)} + R_{nn} \sum_{h=1}^{s-1} \beta^h \Delta E_n^{(h)} \\
 & \quad + \beta^s \sum_{h=1}^{s-2} \Delta E_n^{(h)} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} S_{nk} \Delta C_k^{(s-1-h)} + \sum_{h=1}^{s-3} \beta^h \Delta E_n^{(h)} \sum_{t=1}^{s-2-h} \beta^{t+1} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} S_{nk} \Delta C_k^{(t)}.
 \end{aligned} \tag{27}$$

So sánh (26) và (27), ta thu được

$$\Delta E_n^{(s)} = \frac{1}{R_{nn}} \left[\sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} (V_{nk} - E_n^{(0)} S_{nk}) \Delta C_k^{(s-1)} - \sum_{h=1}^{s-2} \Delta E_n^{(h)} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} S_{nk} \Delta C_k^{(s-1-h)} \right] \tag{28}$$

Hàm sóng bổ chính bậc (s). Ta tiếp tục tìm hệ số khai triển hàm sóng bậc (s) bằng cách thay (24) vào (23) và tiến hành rút gọn

$$\begin{aligned}
 & R_{jj} (E_j^{(0)} - E_n^{(0)}) \sum_{h=1}^{+\infty} \beta^h \Delta C_j^{(h)} + \beta V_{jn} + \sum_{t=1}^{+\infty} \beta^{t+1} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} \Delta C_k^{(t)} V_{jk} \\
 &= \beta E_n^{(0)} S_{jn} + E_n^{(0)} \sum_{h=1}^{+\infty} \beta^{h+1} \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} \Delta C_k^{(h)} S_{jk} + R_{jj} \sum_{t=1}^{+\infty} \beta^t \Delta E_n^{(t)} \sum_{h=1}^{+\infty} \beta^h \Delta C_j^{(h)} \\
 & \quad + S_{jn} \sum_{t=1}^{+\infty} \beta^{t+1} \Delta E_n^{(t)} + \sum_{t=1}^{+\infty} \beta^{t+1} \Delta E_n^{(t)} \sum_{h=1}^{+\infty} \beta^h \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} \Delta C_k^{(h)} S_{jk}.
 \end{aligned} \tag{29}$$

Tương tự như các bước tìm năng lượng bổ chính, ta lần lượt tìm hệ số khai triển bậc 1, $\Delta C_k^{(1)}$; bậc (s-1), $\Delta C_k^{(s-1)}$; và bậc (s). Sau đó so sánh hai biểu thức bậc (s-1) và (s), cuối cùng ta thu được

$$\Delta C_j^{(1)} = \frac{S_{jn} E_n^{(0)} - V_{jn}}{H_{jj} - R_{jj} E_n^{(0)}}, \tag{30}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta C_j^{(s)} = \frac{1}{H_{jj} - R_{jj} E_n^{(0)}} & \left\{ S_{jn} \Delta E_n^{(s-1)} + \sum_{\substack{k=0, \\ k \neq n, j}}^{+\infty} (S_{jk} E_n^{(0)} - V_{jk}) \Delta C_k^{(s-1)} + \right. \\
 & \left. + \sum_{t=1}^{s-1} \Delta E_n^{(t)} R_{jj} \Delta C_j^{(s-t)} + \sum_{t=1}^{s-2} \Delta E_n^{(t)} \sum_{\substack{k=0, \\ k \neq n, j}}^{+\infty} S_{jk} \Delta C_k^{(s-t-1)} \right\}
 \end{aligned} \tag{31}$$

3. Kết quả và thảo luận

3.1. Khảo sát sự hội tụ năng lượng bổ chính

Khi áp dụng mô hình lý thuyết nhiễu loạn, một điều cần quan tâm là sự hội tụ của năng lượng và hàm sóng bậc (s). Để có được sự hội tụ này, thành phần không trung hòa $\hat{V}$ phải đủ nhỏ so với $\hat{H}_0$, nghĩa là

$$|\hat{V}| \square |\hat{H}_0|. \quad (32)$$

Từ biểu thức (11) cho thấy, các yếu tố ma trận của Hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ phụ thuộc vào tham số tự do ω nên ta có thể chọn vùng giá trị này thỏa mãn điều kiện hội tụ (32). Giá trị ω có thể được chọn bằng cách cho $\partial \tilde{E}_n / \partial \omega = 0$, với ý nghĩa là năng lượng không phụ thuộc tham số ω . Tuy nhiên ta không biết được biểu thức giải tích của năng lượng $\tilde{E}_n$ mà chỉ có biểu thức của năng lượng bổ chính bậc không $\tilde{E}_n^{(0)}$ (Hoang-Do, Pham, et al., 2013).

Nhưng trong nghiên cứu này, chúng tôi áp dụng mô hình lý thuyết nhiễu loạn cho thế chắn Keldysh. Từ biểu thức (19), ta thấy yếu tố ma trận phụ thuộc vào tham số ω trong dấu tích phân phức tạp vì có chứa các thông số cấu trúc cơ bản nên chúng tôi phải khảo sát sự hội tụ của tham số ω bằng số. Khi năng lượng hội tụ về giá trị chính xác, các bổ chính sẽ tiến về không. Trong phần này, chúng tôi sẽ khảo sát tham số tự do ω để tìm ra vùng tối ưu để nghiệm số hội tụ nhanh nhất. Kết quả khảo sát ghi trong Bảng 1, một trường hợp ví dụ cho đơn lớp TMD của chất WSe₂ với các thông số cấu trúc cơ bản như hằng số điện môi trung bình $\kappa = 4.5$, tham số chắn $r_0 = 4.2088$ nm và khối lượng rút gọn $\mu = 4.2086m_e$ trong tương tác của từ trường đều 60 Tesla, trong đó ứng với giá trị $\omega = 0.25$ và $\omega = 0.45$ nghiệm số hội tụ 3 số thập phân, lệch so với giá trị chính xác tới 0.5% khi lấy bậc bổ chính $s = 2$. Đặc biệt, tại vùng $\omega = 0.35 \pm 0.05$ nghiệm số hội tụ 6 chữ số thập phân khi lấy bậc bổ chính $s = 9$. Kết quả hội tụ này đủ khảo sát các hiệu ứng từ phổ năng lượng exciton trung hòa khi mà các phân tích phổ năng lượng thực nghiệm khoảng 1 meV (Goryca et al., 2019) và các công trình lý thuyết sử dụng phương pháp biến phân có sai số 4% so với kết quả thực nghiệm (Goryca et al., 2019; Liu et al., 2019; Stier et al., 2018).

Bảng 1. Sự hội tụ của năng lượng trạng thái cơ bản ứng với các thông số cấu trúc cơ bản $\kappa = 4.5$, $r_0 = 4.2088$ nm, $\mu = 4.2086m_e$ và từ trường đều $\gamma = 60$ T.

Bậc gần đúng (s)	$\omega = 0.25$	$\omega = 0.3$	$\omega = 0.35$	$\omega = 0.4$	$\omega = 0.45$
0	-0.027442	-0.028999	-0.029476	-0.028964	-0.027524
2	-0.029572	-0.029995	-0.030053	-0.030351	-0.031509
3	-0.029136	-0.029894	-0.030155	-0.030423	-0.031192
9	-	-0.030177	-0.030197	-0.030186	-
10	-	-0.030204	-0.030197	-0.030207	-
Chính xác	-0.030198 (Nguyen et al., 2019)				

3.2. Năng lượng mức cơ bản của exciton trong đơn lớp TMD của chất WSe₂ trong từ trường đều

Trong phần này, chúng tôi khảo sát sự hội tụ của năng lượng mức cơ bản 1s trong vùng giới hạn của từ trường đều lên tới 120 Tesla, hơn gấp đôi từ trường được tạo ra trong các phòng thí nghiệm hiện nay (Stier et al., 2018). Kết quả được ghi ở Bảng 2 với từ

trường đều có cường độ 20, 40, 60, 80 và 120 Tesla. Kết quả cho thấy, trong toàn miền từ trường từ yếu đến lớn nghiệm số có thể hội tụ đến 6 chữ số thập phân. Với những phép phân tích quang phổ của phòng thí nghiệm hiện nay là 1 meV (Goryca et al., 2019) mô hình này có thể áp dụng cho những bài toán trích xuất thông tin cấu trúc bằng cách so sánh phổ thực nghiệm. Chúng tôi cũng so sánh kết quả của mô hình nhiễu loạn với mô hình giải chính xác phương trình trị riêng, véc-tơ riêng (Nguyen et al., 2019). Kết quả cho thấy, mô hình nhiễu loạn có thể áp dụng để tìm phổ năng lượng cho exciton trong đơn lớp TMD trong từ trường có cường độ đến 120 Tesla. Từ đây, có thể gợi ý cho chúng tôi áp dụng mô hình này để giải phương trình Schrödinger với Hamiltonian dạng phức cho các bài toán exciton đặt trong điện trường hay xét đến hiệu ứng nhiệt độ gây ra bởi sự chuyển động của khối tâm trong từ trường đều.

Bảng 2. Mức năng lượng cơ bản theo cường độ từ trường 20, 40, 60, 80, 120 Tesla ứng với các thông số cấu trúc cơ bản $\kappa = 4.5$, $r_0 = 4.2088$ nm, $\mu = 4.2086m_e$ khi chọn giá trị tham số tự do $\omega = 0.35$.

Bậc gần đúng (s)	$\gamma = 20$	$\gamma = 40$	$\gamma = 60$	$\gamma = 80$	$\gamma = 120$
0	-0.029681	-0.029604	-0.029476	-0.029297	-0.028784
2	-0.030254	-0.030177	-0.030053	-0.029887	-0.029446
3	-0.030346	-0.030275	-0.030155	-0.029988	-0.029513
8	-0.030359	-0.030298	-0.030195	-0.030055	-0.029675
9	-	-	-0.030197	-0.030054	-0.029648
14	-	-	-	-0.030058	-0.029699
Chính xác bằng số (Nguyen et al., 2019)	-0.030359	-0.030298	-0.030198	-0.030059	-0.029676

Mô hình lí thuyết nhiễu loạn có thể tìm năng lượng bổ chính bậc 2 ở dạng giải tích. Để thực hiện mục tiêu này, chúng tôi tách yếu tố ma trận Hamiltonian H_{kn} thành hai phần: phần không chứa từ trường và phần có chứa từ trường, cụ thể:

$$H_{kk} = A_{kk} + B_{kk}\gamma^2, \quad V_{kn} = A_{kn} + B_{kn}\gamma^2. \quad (33)$$

Tiếp theo, ta thay biểu thức (33) và (30) vào (28), sau đó lấy đến bậc bổ chính $s = 2$, cuối cùng rút gọn biểu thức thu được

$$\Delta E_n^{(2)} = -\frac{1}{(R_{nn})^2} \sum_{k=0}^{N_{\max}} y_{kn}(\gamma^2), \quad (34)$$

trong đó, hàm số $y_{kn}(x)$ và các hệ số trong dấu tổng được tính bằng

$$y_{kn}(x) = \frac{a_{kn}x^2 + b_{kn}x + c_{kn}}{d_{kn}x + e_{kn}}, \quad (35)$$

$$a_{kn} = (B_{kn}R_{nn} - B_{nn}S_{kn})^2, \quad b_{kn} = 2(A_{kn}R_{nn} - A_{nn}S_{kn})(B_{kn}R_{nn} - B_{nn}S_{kn}),$$

$$c_{kn} = (A_{kn}R_{nn} - A_{nn}S_{kn})^2, \quad d_{kn} = B_{kk}R_{nn} - B_{nn}R_{kk}, \quad e_{kn} = A_{kk}R_{nn} - A_{nn}R_{kk}.$$

Trong tính toán cụ thể, năng lượng bổ chính đến bậc 2 có thể hội tụ đến 4 chữ số thập phân, sai số 0,4% cho từ trường nhỏ và trong vùng từ trường lớn là 3 chữ số thập phân tương đương 0,7%. Kết quả này đủ để phân tích các hiệu ứng từ phổ năng lượng exciton lí thuyết và thực nghiệm.

4. Kết luận

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã trình bày một cách có hệ thống sơ sở lí thuyết nhiều loạn để giải phương trình Schrödinger dừng với sự điều tiết độ hội tụ của nghiệm thông qua tham số tự do được đưa vào bằng phương pháp toán tử FK. Chúng tôi thu được công thức tổng quát bổ chính năng lượng và hàm sóng bậc (s). Chúng tôi khảo sát tính hội tụ của mô hình lí thuyết nhiều loạn và tìm vùng tham số tự do tối ưu cho mức năng lượng cơ bản của exciton trong đơn lớp TMD của chất WSe₂.

Chúng tôi áp dụng mô hình lí thuyết nhiều loạn thành công cho mô hình thế Keldysh mô tả tương tác của exciton trong từ trường trong đơn lớp TMD với cường độ lớn gấp hai lần cường độ tạo ra trong phòng thí nghiệm hiện nay. Chúng tôi cũng viết được biểu thức tính năng lượng bổ chính bậc 2 bằng giải tích theo cường độ từ trường. Mặc dù, nghiên cứu này chỉ khảo sát mức năng lượng cơ bản nhưng đây là cơ sở quan trọng để phát triển mô hình nhằm giải quyết những bài toán phức tạp hơn, ví dụ như: bài toán exciton trong điện trường và bài toán hiệu ứng nhiệt độ khi xét đến sự chuyển động vì nhiệt của khối tâm của electron và lỗ trống trong từ trường. Trong bài toán này, năng lượng sẽ ở dạng số phức khi mà cơ chế gây ra hiệu ứng nhiệt là bởi hiệu ứng xuyên hầm khác với cơ chế dựa trên cơ chế phonon. Sau nghiên cứu này, chúng tôi tiếp tục nghiên cứu năng lượng và hàm sóng cho các mức kích thích và sẽ công bố trong công trình tiếp theo.

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

❖ **Lời cảm ơn:** Bài báo nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh qua đề tài trọng điểm cấp trường mã số CS.2019.19.44TĐ. Các tác giả chân thành cảm ơn GS TSKH. Lê Văn Hoàng đã hướng dẫn, đặt vấn đề và góp ý, chỉnh sửa cho bài báo.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Cao, T. X. H., Ly, D. N., Hoang, N. T. D., & Le, V. H. (2019). High-accuracy numerical calculations of the bound states of a hydrogen atom in a constant magnetic field with arbitrary strength. *Computer Physics Communications*, 240, 138.
- Chernikov, A., Berkelbach, T. C., Hill, H. M., Rigosi, A., Li, Y., Aslan, O. B.,... Heinz, T. F. (2014). Exciton Binding Energy and Nonhydrogenic Rydberg Series in Monolayer WS₂. *Physical Review Letters*, 113(7), 076802.
- Feranchuk, I., Ivanov, A., Le, V. H., & Ulyanenko, A. (2015). *Non-perturbative Description of Quantum Systems* (vol. 894). Cham: Springer International Publishing.

- Frenkel, J. (1931). On the Transformation of light into Heat in Solids. I. *Physical Review*, 37(1), 17.
- Goryca, M., Li, J., Stier, A. V., Taniguchi, T., Watanabe, K., Courtade, E.,... Crooker, S. A. (2019). Revealing exciton masses and dielectric properties of monolayer semiconductors with high magnetic fields. *Nature Communications*, 10(1), 4172.
- Hoang-Do, N. T., Hoang, V. H., & Le, V. H. (2013). Analytical solutions of the Schrödinger equation for a two-dimensional exciton in magnetic field of arbitrary strength. *Journal of Mathematical Physics*, 54(5), 052105.
- Hoang-Do, N.-T., Pham, D. L., & Le, V. H. (2013). Exact numerical solutions of the Schrödinger equation for a two-dimensional exciton in a constant magnetic field of arbitrary strength. *Physica B: Condensed Matter*, 423, 31.
- Keldysh, L. V. (1979). Coulomb interaction in thin semiconductor and semimetal films. *JETP Lett.*, 29(11), 658.
- Kylänpää, I., & Komsa, H.-P. (2015). Binding energies of exciton complexes in transition metal dichalcogenide monolayers and effect of dielectric environment. *Physical Review B*, 92(20), 205418.
- Levi-Civita, T. (1956). *Opere Metematiche. Memorie e Note. Vol. II: 1901 – 1907*. Bologna: Nicola Zanichelli Editore.
- Liu, E., van Baren, J., Taniguchi, T., Watanabe, K., Chang, Y. C., & Lui, C. H. (2019). Magnetophotoluminescence of exciton Rydberg states in monolayer WSe₂. *Physical Review B*, 99(20), 205420.
- McDonnell, L. P., Viner, J. J. S., Rivera, P., Xu, X., & Smith, D. C. (2020). Observation of intravalley phonon scattering of 2s excitons in MoSe₂ and WSe₂ monolayers. *2D Materials*, 7(4), 045008.
- Nguyen, D. A. P., Ly, D. N., Le, D. N., Hoang, N. T. D., & Le, V. H. (2019). High-accuracy energy spectra of a two-dimensional exciton screened by reduced dimensionality with the presence of a constant magnetic field. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 113, 152.
- Raja, A., Chaves, A., Yu, J., Arefe, G., Hill, H. M., Rigosi, A. F.,... Chernikov, A. (2017). Coulomb engineering of the bandgap and excitons in two-dimensional materials. *Nature Communications*, 8(May), 1.
- Rytova, N. S. (1967). The screened potential of a point charge in a thin film. *Vestnik Moskovskogo Universiteta. Fizika*, 22(3), 30-37.
- Stier, A. V., Wilson, N. P., Velizhanin, K. A., Kono, J., Xu, X., & Crooker, S. A. (2018). Magneto-optics of Exciton Rydberg States in a Monolayer Semiconductor. *Physical Review Letters*, 120(5), 057405.
- Wannier, G. H. (1937). The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals. *Physical Review*, 52(3), 191.

**REGULATED PERTURBATION THEORY FOR NEUTRAL EXCITON ENERGY
IN A UNIFORM MAGNETIC FIELD**

**Ly Duy Nhat^{1*}, Huynh Nguyen Thanh Truc², Nguyen Luc Hoang Minh¹,
Nguyen Nhat Quang¹, Doan Phuoc Thien¹, Phan Ngoc Hung¹**

¹Ho Chi Minh City University of Education, Vietnam

²Marie Curie High School, Ho Chi Minh City, Vietnam

*Corresponding author: Ly Duy Nhat – Email: nhatld@hcmue.edu.vn

Received: February 08, 2022; Revised: March 22, 2022; Accepted: March 25, 2022

ABSTRACT

Two-dimensional excitons in magnetic fields is an important problem because of the latest achievements in the application of exciton energy spectroscopy to retrieve structural information of monolayer transition metal dichalcogenides (TMD). The Feranchuk-Komarov (FK) operator method has been successfully used to calculate the numerical energy spectra for this system. In this work, the perturbation theory with the regulation of free parameter is used to calculate the neutral exciton energy in a uniform magnetic field with Keldysh potential. We first discussed the perturbation theory with general formulas. Then, the convergence of the solution taking into account the higher-order correction was studied with magnetic fields up to 120 Tesla. Numerical calculations are presented for ground states, on the other hand, general expressions allow calculations for excited states. The results are accurate with an error of less than 1% facilitating the further study of the problem to have an explicit analytical solution.

Keywords: annihilation and creation operators; basic set; FK operator method; exciton; Keldysh potential; two-dimensional atomic systems