TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM TP HỒ CHÍ MINH
TẠP CHÍ KHOA HỌC
KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ CÔNG NGHỆ
Tập 15, Số 9 (2018): 22-34

HO CHI MINH CITY UNIVERSITY OF EDUCATION
JOURNAL OF SCIENCE
NATURAL SCIENCES AND TECHNOLOGY
Vol. 15, No. 9 (2018): 22-34

ISSN: 1859-3100

Email: tapchikhoahoc@hcmue.edu.vn; Website: http://tckh.hcmue.edu.vn

YẾU TỐ MA TRẬN CHO NGUYÊN TỬ HELI HAI CHIỀU

***Nguyễn Phương Duy Anh*[1], *Hoàng Đỗ Ngọc Trầm*[2*]**

[1] *Khoa Khoa học Tự nhiên - Trường Đại học Thủ Dầu Một*

[2] *Khoa Vật lí - Trường Đại học Sư phạm TP Hồ Chí Minh*

Ngày nhận bài: 12-7-2018; ngày nhận bài sửa: 14-9-2018; ngày duyệt đăng: 21-9-2018

TÓM TẮT

Dạng tường minh của các yếu tố ma trận cho nguyên tử heli hai chiều được biểu diễn cụ thể, giúp thuận lợi cho việc lập trình tính toán. Ngoài ra, các yếu tố ma trận này còn có thể được sử dụng để tính cho các bài toán nguyên tử hai chiều khác như exciton âm, exciton âm trong trường ngoài.

Từ khóa: nguyên tử heli, hai chiều, phương pháp toán tử FK, yếu tố ma trận.

ABSTRACT

Matrix elements for two-dimensional helium atom

Matrix elements under explicit form of two-dimensional helium atom, which facilitate the computational programming, are shown in details. In addition, these matrix elements can also be used to calculate for other two-dimensional atomic problems such as negatively charged exciton, negatively charged exciton in the external field.

Keywords: heli atom, two dimentional, FK operator method, matrix elements.

1. Mở đầu

Thành công từ việc phát hiện ra graphene đã dẫn đến sự ra đời của hàng loạt các vật liệu hai chiều. Hằng năm, có hơn 150 loại vật liệu có thể dễ dàng tách ra thành lớp mỏng có độ dày bằng một nguyên tử, trong đó Transition-Metal Dichacolgenides hai chiều (viết tắt là 2D TMDs hoặc TMDC) đang rất được quan tâm [1]. Những tiến bộ gần đây trong việc nghiên cứu 2D TMDs đã mở ra nhiều tiềm năng phát triển cho các lĩnh vực sử dụng công nghệ nano trong các linh kiện điện tử, cảm biến và quang điện tử… [1] và đã thu hút được sự quan tâm của các nhóm nghiên cứu cả lí thuyết lẫn thực nghiệm [2]. 2D TMDs có công thức hóa học là MX_2, trong đó M là kim loại chuyển tiếp (Mo, W…) và X là nguyên tử chacolgen (một họ của oxygen gồm O, Se, Te...); ví dụ như: MoS_2, WS_2, $MoSe_2$ và WSe_2. Hợp chất này là chất bán dẫn tự nhiên, thể hiện các tính chất quang điện độc đáo do sự giam giữ lượng tử và các hiệu ứng bề mặt phát sinh trong quá trình dịch chuyển điện tử giữa các đơn lớp. Các nghiên cứu cho thấy dịch chuyển quang học chủ yếu trong 2D TMDs là hình thành các exciton. Năng lượng liên kết của các exciton này phụ thuộc vào môi trường xung quanh thể hiện qua hệ số điện môi. Ngoài ra, các nghiên cứu quang phát quang trên các đơn lớp 2D TMDs cho thấy các exciton còn có thể liên kết với

* Email: *tramhdn@hcmup.edu.vn*

một điện tử hoặc một lỗ trống để hình thành các trion [3], các trion này bao gồm exciton dương và exciton âm [4]. Do hiệu ứng của hệ thấp chiều, nên trong 2D TMDs khối lượng hiệu dụng của các hạt dẫn tăng, hệ số điện môi giảm dẫn đến việc tương tác giữa điện tử với điện tử, điện tử với lỗ trống tăng lên. Vì vậy, có thể dễ dàng khảo sát được phổ năng lượng liên kết của các exciton, exciton âm, exciton dương… thông qua các phép đo quang học ngay cả ở nhiệt độ phòng [1].

Bên cạnh các đo đạc thực nghiệm, có nhiều nghiên cứu lí thuyết về phổ năng lượng của các exciton, exciton âm, exciton dương trong hệ thấp chiều [5] bằng nhiều phương pháp khác nhau. Trong công trình [6], các tác giả đã sử dụng phương pháp toán tử FK (FK Operator Method, viết tắt là FK-OM) để tìm nghiệm chính xác cũng như nghiệm giải tích cho bài toán exciton hai chiều trong từ trường với độ chính xác đến 20 chữ số thập phân cho trạng thái cơ bản cũng như cho trạng thái kích thích. Ngoài ra, FK-OM đã được xây dựng và ứng dụng thành công cho các bài toán vật lí chất rắn, lí thuyết trường, vật lí nguyên tử, phân tử [7]. Từ thành công trong việc tính toán cho bài toán exciton trung hòa (bài toán một hạt) thì việc tiếp tục phát triển FK-OM cho các bài toán nguyên tử phức tạp như heli, exciton âm… là rất có ý nghĩa.

Trong phần tính toán này, chúng tôi tiếp tục sử dụng toán tử Hamilton và bộ hàm cơ sở dạng đại số đã được xây dựng trong công trình [8] để xây dựng các yếu tố ma trận cần thiết cho việc lập trình tính toán cho nguyên tử heli hai chiều. Mặc khác, do exciton âm và nguyên tử heli có cấu trúc tương tự nhau nên trong các biểu thức tính toán, chúng sẽ sử dụng kí hiệu khối lượng hiệu dụng cho điện tử và lỗ trống để tăng tính tổng quát cho các biểu thức.

Đối với các bài toán nguyên tử, trong công trình [9] đã chỉ ra rằng có thể đưa về dạng bài toán dao động tử điều hòa thông qua phép biến đổi Levi-Civita để giải. Nhưng với bài toán nguyên tử heli hai chiều, do có đến ba số hạng tương tác Coulomb, vì vậy khi tính toán ngoài việc tiếp tục sử dụng phép biến đổi Levi-Civita ta còn sử dụng thêm phép biến đổi Fourier để đưa các số hạng tương tác Coulomb về dạng đa thức. Kết quả thu được là, chúng tôi không chỉ xây dựng được biểu thức tính tường minh cho các yếu tố ma trận, mà còn chỉ ra được trường hợp cụ thể để yếu tố ma trận khác không, tính đối xứng của các yếu tố ma trận, miền xác định của các chỉ số lượng tử, điều này giúp tiết kiệm tài nguyên cũng như thời gian tính toán, đây là điều rất quan trọng trong khi lập trình để tìm nghiệm số chính xác cho bài toán.

2. Cơ sở lí thuyết

2.1. Phương pháp toán tử FK (FK-OM)

Trong FK-OM, bộ hàm sóng cơ sở được sử dụng là dao động tử điều hòa. Trong công trình [9] đã chỉ ra mối liên hệ giữa bài toán nguyên tử hai chiều trong không gian (x, y) với bài toán dao động tử điều hòa hai chiều trong không gian (u, v) thông qua phép biến đổi Levi-Civita có dạng

$$\begin{cases} x = u^2 - v^2, \\ y = 2uv, \end{cases} \quad (1)$$

với $dxdy = 4(u^2 + v^2)\,dudv,\ r = \sqrt{x^2 + y^2} = u^2 + v^2$ [10]. Khi đó phương trình Schrödinger cho nguyên tử trong không gian (x, y) là

$$\hat{H}\left|\psi\left(x, y\right)\right\rangle = E\left|\psi\left(x, y\right)\right\rangle \quad (2)$$

trở thành phương trình

$$\tilde{H}\left|\psi\left(u, v\right)\right\rangle = 0, \quad (3)$$

với $\tilde{H} = r\left(\hat{H} - E\right)$. Trong đó $\tilde{H}$ có dạng là toán tử Hamilton của dao động tử điều hòa [9]. Như vậy, khi sử dụng bộ hàm sóng cơ sở là dao động tử điều hòa trong không gian (u, v) cũng chính là bộ hàm sóng nguyên tử trong không gian (x, y).

Mặt khác, FK-OM dựa trên cơ sở là lí thuyết nhiễu loạn [11], với thành phần chính của toán tử Hamilton $\tilde{H}$ là $\hat{H}_0$ có dạng dao động tử điều hòa, luôn tìm được nghiệm chính xác E_0 và điều kiện hội tụ của bài toán luôn được đảm bảo nhờ vào tham số ω. Đây là tham số thực dương, được đưa vào để hiệu chỉnh bộ hàm sóng cơ sở dưới hình thức tần số dao động của dao động tử điều hòa. Giá trị của ω tuy không ảnh hưởng đến kết quả của bài toán vì toán tử Hamilton $\tilde{H}$ không phụ thuộc vào ω, nhưng có ý nghĩa trong việc điều chỉnh tốc độ hội tụ của bài toán. Nhờ vào tham số này, thành phần nhiễu loạn luôn được điều chỉnh nhỏ hơn thành phần chính mà không cần tính đến độ lớn của trường ngoài [12]. Vì vậy, khi sử dụng phương pháp này không chỉ tính được năng lượng cho vùng trường ngoài có cường độ mạnh và yếu mà còn tính được năng lượng cho vùng trường ngoài có cường độ trung bình [6], là vùng mà điều kiện lí nhiễu loạn không được đảm bảo.

Đối với các bài toán có sự bảo toàn moment động lượng thì ta có thể đưa thêm đặc điểm này vào bộ hàm cơ sở để giúp cho việc tính toán các yếu tố ma trận trở nên đơn giản hơn [6].

2.2. Phương pháp đại số giải phương trình Schrödinger của heli hai chiều

Phương trình Schrödinger của nguyên tử heli hai chiều sau khi sử dụng phép biến đổi Levi-Civita và phép biến đổi Fourier [8] có thể đưa về dạng của bài toán dao động tử phi điều hòa có dạng

$$\tilde{H}\left|\psi\left(u_1, v_1, u_2, v_2\right)\right\rangle = 0, \quad (4)$$

với

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= \left(u_1^2 + v_1^2\right)\left[-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_2{}^2} + \frac{\partial^2}{\partial v_2{}^2}\right) - \frac{1}{2}\left(u_2^2 + v_2^2\right)E - Z^*\right] \\ &+ \left(u_2^2 + v_2^2\right)\left[-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_1{}^2} + \frac{\partial^2}{\partial v_1{}^2}\right) - \frac{1}{2}\left(u_1^2 + v_1^2\right)E - Z^*\right] \\ &- \frac{\alpha_h^*}{4}\left[\begin{array}{l}\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_1} - v_1\frac{\partial}{\partial v_1}\right)\left(u_2\frac{\partial}{\partial u_2} - v_2\frac{\partial}{\partial v_2}\right) \\ + \left(v_1\frac{\partial}{\partial u_1} + u_1\frac{\partial}{\partial v_1}\right)\left(v_2\frac{\partial}{\partial u_2} + u_2\frac{\partial}{\partial v_2}\right)\end{array}\right] \\ &+ \frac{\left(u_1^2 + v_1^2\right)\left(u_1^2 + v_1^2\right)}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}e^{\left[i\left(u_1{}^2 - v_1{}^2 - u_2{}^2 + v_2{}^2\right)t_1 + 2i\left(u_1v_1 - u_2v_2\right)t_2\right]}dt_1dt_2.\end{aligned} \tag{5}$$

Trong toán tử Hamilton (5) vẫn chứa thành phần của dao động tử điều hòa theo từng chỉ số $\left(u_1, v_1\right)$ và $\left(u_2, v_2\right)$, nhưng do bài toán có số hạng tương tác Coulomb giữa các điện tử với nhau nên sau khi sử dụng phép biến đổi Levi-Civita và phép biến đổi Fourier thì toán tử Hamilton có thêm các thành phần khác như trong (5), nhưng về nguyên tắc ta vẫn có thể áp dụng phương pháp giải bài toán dao động tử phi điều hòa để giải. Để giải phương trình (4), ta có thể sử dụng phương pháp giải tích hoặc phương pháp đại số. Trong phần này, ta sẽ sử dụng phương pháp đại số thông qua định nghĩa các toán tử sinh hủy Dirac để giải bài toán.

Ta sử dụng các toán tử sinh, hủy Dirac được định nghĩa như sau:

$$\begin{aligned}\hat{u}_s &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u_s + \frac{\partial}{\partial u_s}\right), \qquad \hat{u}_s^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u_s - \frac{\partial}{\partial u_s}\right), \\ \hat{v}_s &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(v_s + \frac{\partial}{\partial v_s}\right), \qquad \hat{v}_s^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(v_s - \frac{\partial}{\partial v_s}\right),\end{aligned} \tag{6}$$

với $s = 1,2$. Các toán tử này thỏa mãn các hệ thức giao hoán đặc trưng của các toán tử sinh hủy $\left[\hat{u}_s, \hat{u}_t^+\right] = \delta_{st}, \left[\hat{v}_s, \hat{v}_t^+\right] = \delta_{st}$, với kí hiệu delta-Kronecker δ_{st} được sử dụng.

Do bài toán ta đang xét có bảo toàn moment động lượng $\hat{L}_z$, mặc khác bộ hàm sóng cơ sở được chọn là dao động tử điều hòa nên để toán tử Hamilton (5) và toán tử $\hat{L}_z$ có hàm riêng chung thì $\hat{L}_z$ phải có dạng trung hòa. Khi định nghĩa các toán tử sinh hủy như trong (6) thì $\hat{L}_z$ có dạng không trung hòa, vì vậy ta sẽ sử dụng phép biến đổi chính tắc để tổ hợp lại các toán tử sinh hủy (6) dưới dạng

$$\hat{a}_s = \frac{1}{2\sqrt{2\omega}}\left[\left(\omega + 1\right)\left(\hat{u}_s + i\hat{v}_s\right) + \left(\omega - 1\right)\left(\hat{u}_s^+ + i\hat{v}_s^+\right)\right],$$

$$\hat{a}_s^+ = \frac{1}{2\sqrt{2\omega}}\left[(\omega-1)(\hat{u}_s - i\hat{v}_s) + (\omega+1)(\hat{u}_s^+ - i\,\hat{v}_s^+)\right],$$
$$\hat{b}_s = \frac{1}{2\sqrt{2\omega}}\left[(\omega+1)(\hat{u}_s - i\hat{v}_s) + (\omega-1)(\hat{u}_s^+ - i\hat{v}_s^+)\right], \tag{7}$$
$$\hat{b}_s^+ = \frac{1}{2\sqrt{2\omega}}\left[(\omega-1)(\hat{u}_s + i\,\hat{v}_s) + (\omega+1)(\hat{u}_s^+ + i\,\hat{v}_s^+)\right].$$

Khi đó $\hat{L}_z$ có biểu thức:

$$\hat{L}_z = -\frac{1}{2}\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 - \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 - \hat{b}_2^+\hat{b}_2\right). \tag{8}$$

Các toán tử mới này cũng thỏa mãn hệ thức giao hoán đặc trưng của các toán tử sinh hủy

$$\left[\hat{a}_s, \hat{a}_t^+\right] = \delta_{st}, \qquad \left[\hat{b}_s, \hat{b}_t^+\right] = \delta_{st}. \tag{9}$$

Khi tổ hợp các toán tử sinh hủy như trong (7), ta cũng đưa vào tham số tự do ω để đảm bảo điều kiện hội tụ của bài toán. Khi đó ta viết toán tử Hamilton của phương trình (4) được biểu diễn thông qua các toán tử sinh hủy (7) có dạng:

$$\tilde{H} = \tilde{H}^R - E\tilde{R}, \tag{10}$$

với

$$\tilde{H}^R = \tilde{H}_1 + \tilde{H}_2 + \tilde{H}_3, \tag{11}$$

$$\begin{aligned}\tilde{H}_1 = \frac{1}{8}\left(\hat{M}_1^+ + \hat{N}_1 + \hat{M}_1\right)\left(-\hat{M}_2^+ + \hat{N}_2 - \hat{M}_2\right) + \frac{1}{8}\left(\hat{M}_2^+ + \hat{N}_2 + \hat{M}_2\right)\left(-\hat{M}_1^+ + \hat{N}_1 - \hat{M}_1\right)\\ - \frac{Z^*}{\omega}\left(\hat{M}_1^+ + \hat{N}_1 + \hat{M}_1 + \hat{M}_2^+ + \hat{N}_2 + \hat{M}_2\right),\end{aligned} \tag{12}$$

$$\tilde{H}_2 = -\frac{\alpha_h^*}{8}\left[\left(\hat{a}_1^{+2} - \hat{b}_1^{\,2}\right)\left(\hat{b}_2^{+2} - \hat{a}_2^{\,2}\right) + \left(\hat{a}_1^{\,2} - \hat{b}_1^{+2}\right)\left(\hat{b}_2^{\,2} - \hat{a}_2^{+2}\right)\right], \tag{13}$$

$$\begin{aligned}\tilde{H}_3 = {} & \frac{\left(\hat{M}_1^+ + \hat{N}_1 + \hat{M}_1\right)\left(\hat{M}_2^+ + \hat{N}_2 + \hat{M}_2\right)}{\pi\omega}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt_1\,dt_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}} \times \\
& \times e^{\frac{-\sqrt{t_1^2+t_2^2}}{4\left(t_1^2+t_2^2\right)+1}\hat{A}_1^+}\, e^{\frac{-4\left(t_1^2+t_2^2\right)}{4\left(t_1^2+t_2^2\right)+1}\hat{M}_1^+}\, e^{2\sqrt{t_1^2+t_2^2}\,\hat{m}_1^+}\, e^{-\frac{1}{2}\ln\left[1+4\left(t_1^2+t_2^2\right)\right]\hat{n}_1}\, e^{-2\sqrt{t_1^2+t_2^2}\,\hat{m}_1} \\
& \times\left[4\left(t_1^2+t_2^2\right)+1\right]^{-\hat{N}_1/2} e^{\frac{-4\left(t_1^2+t_2^2\right)}{4\left(t_1^2+t_2^2\right)+1}\hat{M}_1}\, e^{\frac{\sqrt{t_1^2+t_2^2}}{4\left(t_1^2+t_2^2\right)+1}\hat{A}_1} \\
& \times e^{\frac{\sqrt{t_1^2+t_2^2}}{4\left(t_1^2+t_2^2\right)+1}\hat{A}_2^+}\, e^{\frac{-4\left(t_1^2+t_2^2\right)}{4\left(t_1^2+t_2^2\right)+1}\hat{M}_2^+}\, e^{2\sqrt{t_1^2+t_2^2}\,\hat{m}_2^+}\, e^{-\frac{1}{2}\ln\left[1+4\left(t_1^2+t_2^2\right)\right]\hat{n}_2}\, e^{-2\sqrt{t_1^2+t_2^2}\,\hat{m}_2} \\
& \times\left[4\left(t_1^2+t_2^2\right)+1\right]^{-\hat{N}_2/2} e^{\frac{-4\left(t_1^2+t_2^2\right)}{4\left(t_1^2+t_2^2\right)+1}\hat{M}_2}\, e^{\frac{-\sqrt{t_1^2+t_2^2}}{4\left(t_1^2+t_2^2\right)+1}\hat{A}_2},\end{aligned} \tag{14}$$

$$\tilde{R} = \frac{1}{\omega^2}\left(\hat{M}_1^+ + \hat{N}_1 + \hat{M}_1\right)\left(\hat{M}_2^+ + \hat{N}_2 + \hat{M}_2\right), \tag{15}$$

trong đó, các toán tử mới $\hat{A}_1^+$, $\hat{A}_1$, $i\hat{K}_1$, $\hat{M}_1$, $\hat{M}_1^+$, $\hat{N}_1$, $\hat{m}_1^+$, $\hat{m}_1$, $\hat{n}_1$, $\hat{A}_2^+$, $\hat{A}_2$, $i\hat{K}_2$, $\hat{M}_2$, $\hat{M}_2^+$, $\hat{N}_2$, $\hat{m}_2^+$, $\hat{m}_2$, $\hat{n}_2$ được định nghĩa dưới dạng:

$$\begin{aligned}
&\hat{A}_s^+ = \frac{-it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\hat{a}_s^{+2} + \frac{-it_1 - t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\hat{b}_s^{+2}, \hat{A}_s = \frac{it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\hat{a}_s^{\,2} + \frac{it_1 - t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\hat{b}_s^{\,2},\\
&i\hat{K}_s = \frac{-it_1 - t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\hat{a}_s\hat{b}_s^+ + \frac{-it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\hat{a}_s^+\hat{b}_s,\\
&\hat{M}_s = \hat{a}_s\hat{b}_s, \hat{M}_s^+ = \hat{a}_s^+\hat{b}_s^+, \hat{N}_s = \hat{a}_s^+\hat{a}_s + \hat{b}_s^+\hat{b}_s + 1, \quad (s = 1, 2),\\
&\hat{m}_1^+ = \left(\frac{it_1 - t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\right)\hat{a}_1^+\hat{b}_1, \quad \hat{m}_1 = -\left(\frac{it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\right)\hat{a}_1\hat{b}_1^+, \qquad \hat{n}_1 = \hat{a}_1^+\hat{a}_1 - \hat{b}_1^+\hat{b}_1,\\
&\hat{m}_2^+ = -\left(\frac{it_1 - t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\right)\hat{a}_2^+\hat{b}_2, \quad \hat{m}_2 = \left(\frac{it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\right)\hat{a}_2\hat{b}_2^+, \qquad \hat{n}_2 = \hat{a}_2^+\hat{a}_2 - \hat{b}_2^+\hat{b}_2.
\end{aligned} \tag{16}$$

Các toán tử này được đưa vào nhằm biểu diễn $\tilde{H}$ thuận lợi hơn và chúng cũng tạo thành bộ đại số kín như trong [8].

3. Bộ hàm cơ sở dạng đại số

Trên cơ sở mối liên hệ được thiết lập ở trên, ta sẽ thiết lập hàm sóng của bài toán nguyên tử heli hai chiều dựa vào hàm sóng của dao động tử điều hòa hai chiều. Hàm sóng này sẽ được sử dụng để tính các yếu tố ma trận trong phần sau. Để sử dụng phương pháp đại số trong tính toán, hàm sóng của dao động tử điều hòa hai chiều sẽ được xây dựng trên cơ sở biểu diễn toán tử sinh hủy Dirac đã được định nghĩa như trong (7). Bộ hàm cơ sở của bài toán là bộ hàm riêng hệ hai dao động tử điều hòa (bốn bậc tự do) có dạng:

$$\left| j_1, j_2, j_3, j_4 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{j_1!\, j_2!\, j_3!\, j_4!}}\left(\hat{a}_1^+\right)^{j_1}\left(\hat{b}_1^+\right)^{j_2}\left(\hat{a}_2^+\right)^{j_3}\left(\hat{b}_2^+\right)^{j_4}\left|0(\omega)\right\rangle, \tag{17}$$

với j_1, j_2, j_3, j_4 là các số nguyên không âm; trạng thái chân không được định nghĩa:

$$\hat{a}_1\left|0(\omega)\right\rangle = 0, \quad \hat{b}_1\left|0(\omega)\right\rangle = 0, \quad \hat{a}_2\left|0(\omega)\right\rangle = 0, \quad \hat{b}_2\left|0(\omega)\right\rangle = 0. \tag{18}$$

Như đã nói ở trên, bộ hàm cơ sở phải thỏa mãn phương trình

$$\hat{L}_z\left| j_1, j_2, j_3, j_4 \right\rangle = m\left| j_1, j_2, j_3, j_4 \right\rangle, \tag{19}$$

với m là số lượng tử từ, nhận các giá trị $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$.

Từ (8) và (19) ta được

$$m = \frac{1}{2}\left(-j_1 + j_2 - j_3 + j_4\right). \tag{20}$$

Từ dạng của m như trong (20), ta định nghĩa

$$n = \frac{1}{2}\left(j_1 + j_2 + j_3 + j_4\right) \tag{21}$$

là số lượng tử chính với n là số nguyên không âm.

Từ (20) và (21) ta được

$$j_3 = n - m - j_1, \quad j_4 = n + m - j_2. \tag{22}$$

Mặt khác, do bài toán bảo toàn $\hat{L}_z$ nên số lượng tử từ m cũng sẽ bảo toàn. Vì vậy, ta sẽ viết lại bộ hàm sóng $\left| j_1, j_2, j_3, j_4 \right\rangle$ thành bộ hàm sóng $\left| n, m, j_1, j_2 \right\rangle$ đã được chuẩn hóa như sau:

$$\left| n, m, j_1, j_2 \right\rangle = \frac{\left(\hat{a}_1^+\right)^{j_1} \left(\hat{b}_1^+\right)^{j_2} \left(\hat{a}_2^+\right)^{n-m-j_1} \left(\hat{b}_2^+\right)^{n+m-j_2}}{\sqrt{j_1!\, j_2! (n-m-j_1)! (n+m-j_2)!}} \left| 0(\omega) \right\rangle, \tag{23}$$

trong đó, các chỉ số lượng tử n, m, j_1, j_2 có miền xác định:

$$0 \le j_1 \le n - m, \; 0 \le j_2 \le n + m, \; |m| \le n. \tag{24}$$

Vì các vector trạng thái (4) tạo thành một bộ cơ sở đầy đủ, nên lời giải chính xác của hàm sóng có thể viết dưới dạng tổ hợp tuyến tính của các hàm cơ sở (23):

$$\left| \psi_{n,m,j_1,j_2} \right\rangle = \left| n, m, j_1, j_2 \right\rangle + \sum_{\substack{k=|m| \\ k \ne n}}^{+\infty} \sum_{\substack{l=|m| \\ l \ne j_1}}^{+\infty} \sum_{\substack{h=|m| \\ h \ne j_2}}^{+\infty} C_{k,l,h} \left| k, m, l, h \right\rangle \tag{25}$$

với $C_{k,l,h}$ là các hệ số thực.

Từ đây, bộ hàm cơ sở (25) sẽ được sử dụng để tính các yếu tố ma trận không chỉ cho bài toán heli hai chiều mà còn cho các bài toán exciton âm hai chiều, exciton âm hai chiều trong trường ngoài.

4. Các yếu tố ma trận

Để tính các yếu tố ma trận, ta viết lại phương trình (4) dưới dạng:

$$\tilde{H}^R \left| \psi \right\rangle = E \tilde{R} \left| \psi \right\rangle, \tag{26}$$

thay (25) vào (26) ta được:

$$\tilde{H}^R \left| \psi_{n,j_1,j_2}(m) \right\rangle = E \tilde{R} \left| \psi_{n,j_1,j_2}(m) \right\rangle. \tag{27}$$

Khi đó, các yếu tố ma trận có dạng

$$\begin{aligned} \left(\tilde{H}^R\right)^{m}_{\substack{n+ns,n \\ j_1+js+2ss,j_1 \\ j_2+js,j_2}} &= \left\langle n+ns, j_1+js+2ss, j_2+js(m) \right| \tilde{H}^R \left| n, j_1, j_2(m) \right\rangle, \\ \left(\tilde{R}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n \\ j_1+js+2ss,j_1 \\ j_2+js,j_2}} &= \left\langle n+ns, j_1+js+2ss, j_2+js(m) \right| \tilde{R} \left| n, j_1, j_2(m) \right\rangle. \end{aligned} \tag{28}$$

Khi đó, ta có thể sử dụng các yếu tố ma trận này để tìm nghiệm số chính xác cho phương trình (27) bằng lí thuyết nhiễu loạn, sơ đồ vòng lặp hoặc giải trực tiếp hệ phương trình tuyến tính bằng gói LAPACK của thư viện Intel® Math Kernel.

Từ định nghĩa của các trạng thái chân không (18) và bộ hàm cơ sở (23) ta thu được các yếu tố ma trận như sau:

3.1. *Yếu tố ma trận* $\left(\tilde{R}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,\,j_1\\ j_2+js,\,j_2}}$

Các yếu tố ma trận khác không của $\left(\tilde{R}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,\,j_1\\ j_2+js,\,j_2}}$ có dạng:

$$\begin{aligned}
\left(\tilde{R}\right)^{m}_{\substack{n,n\\ j_1,j_1\\ j_2,j_2}} &= \frac{1}{\omega^2}\left(j_1+j_2+1\right)\left(2n-j_1-j_2+1\right),\\
\left(\tilde{R}\right)^{m}_{\substack{n,n\\ j_1,j_1+1\\ j_2,j_2+1}} &= \frac{1}{\omega^2}\sqrt{\left(j_1+1\right)\left(j_2+1\right)}\sqrt{\left(n-m-j_1\right)\left(n+m-j_2\right)},\\
\left(\tilde{R}\right)^{m}_{\substack{n,n+1\\ j_1,j_1\\ j_2,j_2}} &= \frac{1}{\omega^2}\left(j_1+j_2+1\right)\sqrt{\left(n-m-j_1+1\right)\left(n+m-j_2+1\right)},\\
\left(\tilde{R}\right)^{m}_{\substack{n,n+1\\ j_1,j_1+1\\ j_2,j_2+1}} &= \frac{1}{\omega^2}\left(2n-j_1-j_2+1\right)\sqrt{\left(j_1+1\right)\left(j_2+1\right)},\\
\left(\tilde{R}\right)^{m}_{\substack{n,n+2\\ j_1,j_1+1\\ j_2,j_2+1}} &= \frac{1}{\omega^2}\sqrt{\left(j_1+1\right)\left(j_2+1\right)}\sqrt{\left(n-m-j_1+1\right)\left(n+m-j_2+1\right)}.
\end{aligned} \tag{29}$$

3.2. *Yếu tố ma trận* $\tilde{H}_1$

Ta thu được các yếu tố ma trận khác không của $\tilde{H}_1$ như sau:

$$\begin{aligned}
\left(\tilde{H}_1\right)^{m}_{\substack{n,n\\ j_1,j_1\\ j_2,j_2}} &= \frac{1}{4}\left(j_1+j_2+1\right)\left(2n-j_1-j_2+1\right)-\frac{Z^*}{\omega}\left(2n+2\right),\\
\left(\tilde{H}_1\right)^{m}_{\substack{n,n\\ j_1,j_1+1\\ j_2,j_2+1}} &= -\frac{1}{4}\sqrt{\left(j_1+1\right)\left(j_2+1\right)}\sqrt{\left(n-m-j_1\right)\left(n+m-j_2\right)},\\
\left(\tilde{H}_1\right)^{m}_{\substack{n,n+1\\ j_1,j_1\\ j_2,j_2}} &= -\frac{Z^*}{\omega}\sqrt{\left(n-m-j_1+1\right)\left(n+m-j_2+1\right)},\\
\left(\tilde{H}_1\right)^{m}_{\substack{n,n+1\\ j_1,j_1+1\\ j_2,j_2+1}} &= -\frac{Z^*}{\omega}\sqrt{\left(j_1+1\right)\left(j_2+1\right)},\\
\left(\tilde{H}_1\right)^{m}_{\substack{n,n+2\\ j_1,j_1+1\\ j_2,j_2+1}} &= -\frac{1}{4}\sqrt{\left(j_1+1\right)\left(j_2+1\right)}\sqrt{\left(n-m-j_1+1\right)\left(n+m-j_2+1\right)}.
\end{aligned} \tag{30}$$

3.3. *Yếu tố ma trận* $\tilde{H}_2$

Tương tự, yếu tố ma trận khác không của $\tilde{H}_2$ có dạng:

$$\begin{aligned}
\left(\tilde{H}_2\right)^{m}_{\substack{n,n+2\\ j_1,j_1+2\\ j_2,j_2}} &= -\frac{\alpha_h^*}{8}\sqrt{\left(n+m-j_2+1\right)\left(n+m-j_2+2\right)}\sqrt{\left(j_1+1\right)\left(j_1+2\right)},\\
\left(\tilde{H}_2\right)^{m}_{\substack{n,n+2\\ j_1,j_1\\ j_2,j_2+2}} &= -\frac{\alpha_h^*}{8}\sqrt{\left(n-m-j_1+1\right)\left(n-m-j_1+2\right)}\sqrt{\left(j_2+1\right)\left(j_2+2\right)},\\
\left(\tilde{H}_2\right)^{m}_{\substack{n,n\\ j_1,j_1+2\\ j_2,j_2}} &= \frac{\alpha_h^*}{8}\sqrt{\left(n-m-j_1\right)\left(n-m-j_1-1\right)}\sqrt{\left(j_1+1\right)\left(j_1+2\right)},\\
\left(\tilde{H}_2\right)^{m}_{\substack{n,n\\ j_1,j_1\\ j_2,j_2+2}} &= \frac{\alpha_h^*}{8}\sqrt{\left(n+m-j_2\right)\left(n+m-j_2-1\right)}\sqrt{\left(j_2+1\right)\left(j_2+2\right)}.
\end{aligned} \tag{31}$$

Đối với yếu tố ma trận $\tilde{H}_2$, nếu tính cho bài toán heli thì yếu tố ma trận này sẽ bằng không, vì khi đó α_h^* có giá trị rất nhỏ nên ta có thể bỏ qua; nếu tính cho exciton âm, exciton âm trong từ trường, điện trường… thì $\alpha_h^* = \dfrac{m_e^*/m_h^*}{1+m_e^*/m_h^*}$ có giá trị tùy thuộc cụ thể vào từng loại bán dẫn [13].

3.4. Yếu tố ma trận $\tilde{H}_3$

Yếu tố ma trận của $\tilde{H}_3$ là tổng của chín số hạng được trình bày dưới dạng:

$$\begin{aligned}
\left(\tilde{H}_3\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}} &= \left(\tilde{H}_{31}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}} + \left(\tilde{H}_{32}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}} + \left(\tilde{H}_{33}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}}\\
&+ \left(\tilde{H}_{34}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}} + \left(\tilde{H}_{35}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}} + \left(\tilde{H}_{36}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}}\\
&+ \left(\tilde{H}_{37}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}} + \left(\tilde{H}_{38}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}} + \left(\tilde{H}_{39}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}},
\end{aligned} \tag{32}$$

trong đó:

(1)
$$\begin{aligned}
\left(\tilde{H}_{31}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}} &= \frac{2}{\omega}\sqrt{\left(j_1+js+2ss\right)\left(j_2+js\right)}\\
&\times\sqrt{\left(n+ns-js-m-2ss-j_1\right)\left(n+ns-js+m-j_2\right)}\,S_{1,-1,-1},
\end{aligned} \tag{33}$$

với

$$\begin{aligned}
&n\geq 0,\ -n\leq m\leq n,\ 0\leq j_1\leq n-m,\ 0\leq j_2\leq n+m,\\
&ns\geq 2-n,\ 1-j_2\leq js\leq -1+m+n+ns-j_2,\\
&\left[\frac{1-js-j_1}{2}\right]\leq ss\leq\left[\frac{-1-js-m+n+ns-j_1}{2}\right].
\end{aligned} \tag{34}$$

(2) $\left(\tilde{H}_{32}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}} = \dfrac{2}{\omega}\left(1-2js+2n+2ns-2ss-j_1-j_2\right)\sqrt{\left(j_1+js+2ss\right)\left(j_2+js\right)}S_{2,0,-1},$ (35)

với

$$\begin{aligned}&n\ge 0,\ -n\le m\le n,\ 0\le j_1\le n-m,\ 0\le j_2\le n+m,\\&ns\ge 1-n,\ 1-j_2\le js\le m+n+ns-j_2,\\&\left[\frac{1-js-j_1}{2}\right]\le ss\le\left[\frac{-js-m+n+ns-j_1}{2}\right].\end{aligned}\tag{36}$$

(3) $$\left(\tilde{H}_{33}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}}=\frac{2}{\omega}\sqrt{\left(j_1+js+2ss\right)\left(j_2+js\right)}\times\sqrt{\left(1+n+ns-js-m-2ss-j_1\right)\left(1+n+ns-js+m-j_2\right)}\,S_{3,1,-1},\tag{37}$$

với

$$\begin{aligned}&n\ge 0,\ -n\le m\le n,\ 0\le j_1\le n-m,\ 0\le j_2\le n+m,\\&ns\ge -n,\ 1-j_2\le js\le 1+m+n+ns-j_2,\\&\left[\frac{1-js-j_1}{2}\right]\le ss\le\left[\frac{1-js-m+n+ns-j_1}{2}\right].\end{aligned}\tag{38}$$

(4) $$\left(\tilde{H}_{34}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}}=\frac{2}{\omega}\left(1+2js+2ss+j_1+j_2\right)\times\sqrt{\left(n+ns-js-m-2ss-j_1\right)\left(n+ns-js+m-j_2\right)}\,S_{4,-1,0},\tag{39}$$

với

$$\begin{aligned}&n\ge 0,\ -n\le m\le n,\ 0\le j_1\le n-m,\ 0\le j_2\le n+m,\\&ns\ge 1-n,\ -j_2\le js\le -1+m+n+ns-j_2,\\&\left[\frac{-js-j_1}{2}\right]\le ss\le\left[\frac{-1-js-m+n+ns-j_1}{2}\right].\end{aligned}\tag{40}$$

(5) $$\left(\tilde{H}_{35}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}}=\frac{2}{\omega}\left(j_1+j_2+2js+2ss+1\right)\left(1-2js+2n+2ns-2ss-j_1-j_2\right)S_{5,0,0},\tag{41}$$

với

$$\begin{aligned}&n\ge 0,\ -n\le m\le n,\ 0\le j_1\le n-m,\ 0\le j_2\le n+m\\&ns\ge -n,\ -j_2\le js\le m+n+ns-j_2,\\&\left[\frac{-js-j_1}{2}\right]\le ss\le\left[\frac{-js-m+n+ns-j_1}{2}\right].\end{aligned}\tag{42}$$

(6) $$\left(\tilde{H}_{36}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}}=\frac{2}{\omega}\left(1+2js+2ss+j_1+j_2\right)\times\sqrt{\left(1-js-m+n+ns-2ss-j_1\right)\left(1-js+m+n+ns-j_2\right)}S_{6,1,0},\tag{43}$$

với

$$\begin{aligned}&n\geq 0,\ -n\leq m\leq n,\ 0\leq j_1\leq n-m,\ 0\leq j_2\leq n+m,\\ &ns\geq -1-n,\ -j_2\leq js\leq 1+m+n+ns-j_2,\\ &\left[\frac{-js-j_1}{2}\right]\leq ss\leq\left[\frac{1-js-m+n+ns-j_1}{2}\right].\end{aligned}\tag{44}$$

(7) $$\left(\tilde{H}_{37}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}}=\frac{2}{\omega}\sqrt{\left(j_1+js+2ss+1\right)\left(j_2+js+1\right)}\times\sqrt{\left(-js-m+n+ns-2ss-j_1\right)\left(-js+m+n+ns-j_2\right)}\,S_{7,-1,1},\tag{45}$$

với

$$\begin{aligned}&n\geq 0,\ -n\leq m\leq n,\ 0\leq j_1\leq n-m,\ 0\leq j_2\leq n+m\\ &ns\geq -n,\ -1-j_2\leq js\leq -1+m+n+ns-j_2,\\ &\left[\frac{-1-js-j_1}{2}\right]\leq ss\leq\left[\frac{-1-js-m+n+ns-j_1}{2}\right].\end{aligned}\tag{46}$$

(8) $$\left(\tilde{H}_{38}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}}=\frac{2}{\omega}\left(1-2js+2n+2ns-2ss-j_1-j_2\right)\times\sqrt{\left(j_1+js+2ss+1\right)\left(j_2+js+1\right)}\,S_{8,0,1},\tag{47}$$

với

$$\begin{aligned}&n\geq 0,\ -n\leq m\leq n,\ 0\leq j_1\leq n-m,\ 0\leq j_2\leq n+m\\ &ns\geq -1-n,\ -1-j_2\leq js\leq m+n+ns-j_2,\\ &\left[\frac{-1-js-j_1}{2}\right]\leq ss\leq\left[\frac{-js-m+n+ns-j_1}{2}\right].\end{aligned}\tag{48}$$

(9) $$\left(\tilde{H}_{39}\right)^{m}_{\substack{n+ns,n\\ j_1+js+2ss,j_1\\ j_2+js,j_2}}=\frac{2}{\omega}\sqrt{\left(1-js-m+n+ns-2ss-j_1\right)\left(1-js+m+n+ns-j_2\right)}\times\sqrt{\left(j_1+js+2ss+1\right)\left(j_2+js+1\right)}S_{9,1,1},\tag{49}$$

với

$$\begin{aligned}&n\geq 0,\ -n\leq m\leq n,\ 0\leq j_1\leq n-m,\ 0\leq j_2\leq n+m\\ &ns\geq -2-n,\ -1-j_2\leq js\leq 1+m+n+ns-j_2,\\ &\left[\frac{-1-js-j_1}{2}\right]\leq ss\leq\left[\frac{1-js-m+n+ns-j_1}{2}\right].\end{aligned}\tag{50}$$

Trong các công thức trên, kí hiệu $S_{H,L,K}$ được định nghĩa như trong Phụ lục.

Ngoài các yếu tố ma trận khác không được trình bày trên đây, ta có thể tính các yếu tố ma trận khác không còn lại bằng cách sử dụng tính chất đối xứng theo từng cặp chỉ số $(n',n),(j_1',j_1),(j_2',j_2)$.

5. Kết luận

Như vậy, ta đã xây dựng thành công yếu tố ma trận cho bài toán nguyên tử heli hai chiều để giải phương trình Schrödinger (4). Các tính toán đại số này có thể lập trình dễ dàng để tìm nghiệm số với độ chính xác cần thiết. Ngoài ra, các yếu tố ma trận nói trên còn có thể áp dụng để tính cho bài toán exciton âm hai chiều, exciton âm trong từ trường… Trong công trình tiếp theo chúng tôi sẽ sử dụng các yếu tố ma trận này để lập trình và so sánh các kết quả tính với thực nghiệm.

❖ ***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), trong đề tài mã số 103.01-2016.90 và Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh trong đề tài cơ sở mã số CS2016.19.13.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] W. Choi, et al., "Recent development of two-dimensional transition metal dichalcogenides and their applications," *Meterials today*, **20**, pp.116-130, 2017.

[2] A. Chernikov et al., "Exciton binding energy and nonhydrogenic Rydberg series in monolayer WS2," *Phys. Rev. Lett*. **113**, pp.076802-076807, 2014.

[3] D. Jariwala, et al., "Emerging device applications for semiconducting two-dimensional transition metal dichalcogenides," *ACS Nano*, **8**, pp.1102-1120, 2014.

[4] M. A. Lampert, "Mobile and Immobile Effective-Mass-Particle Complexes in Nonmetallic Solids," *Phys. Rev. Lett.* **1**, pp.450-453, 1958.

[5] Wójs, et al., "Exact-diagonalization studies of trion energy spectra in high magnetic fields," *Physical Review B*, **75**, pp.1098-0121, 2017.

[6] Ngoc-Tram Hoang-Do, et al., "Exact numerical solutions of the Schrödinger equation for a two-dimensional exciton in a homogeneous magnetic field of arbitrary strength," *Physica B*, **423**, pp.31-37, 2013.

[7] D. Feranchuk, et al., *Non Perturbative Description of Quantum Systems*, Springer – Switzerland, 2015.

[8] Nguyễn Phương Duy Anh, Hoàng Đỗ Ngọc Trầm, "Phương pháp đại số cho nguyên tử heli hai chiều," *Tạp chí Khoa học Trường ĐHSP TPHCM*, *15*(6), pp.64-75, 2018.

[9] Van Hoang Le, et al., "The algebraic method for two-dimensional quantum atomic systems," *J. Phys. A*, **26**, pp.1409-1418, 1993.

[10] T. Levi-Civita, *Opere Matematiche* **2**, pp.1901-1907, 1956.

[11] Hoàng Đỗ Ngọc Trầm và tgk, "Phương pháp toán tử cho bài toán tương tác điện tử-lỗ trống của khí điện tử hai chiều vối sự có mặt của từ trường và thế màn chắn," *Tạp chí Khoa học Trường ĐHSP TPHCM*, tập **38**, số 4, pp.60-73, 2004.

[12] Quoc Khanh Hoang, et al., "Convergence of the operator method and the free constant choice," *Phys. Math. Ser.*, vol. **3**, pp.71-75, 1997.

[13] C. Kittel, P. McEuen, *Introduction to Solid State Physics*, vol. 8, Wiley New York, 1996.

PHỤ LỤC

Phụ lục: Công thức tường minh của $S_{H,L,K}$

$$
\begin{aligned}
S_{H,L,K} = {} & \sum_{i_{12}=\max\begin{bmatrix} -ss-i_1+i_2-i_7+i_{11} \\ -ss+i_1+i_2+i_5+i_{11}-j_1 \\ 0 \end{bmatrix}}^{\min\begin{bmatrix} -ss-i_1-i_2-i_5+i_{11}+j_2 \\ K+js+ss+i_1+i_2+i_5-i_{11} \\ \frac{K+js+j_2}{2} \end{bmatrix}} \; \sum_{i_{11}=\max\begin{bmatrix} 0 \\ m-n+2i_1-i_2+2i_3-i_4+i_5+i_6+2i_7+2i_8-i_9 \end{bmatrix}}^{\min\begin{bmatrix} L+K+ns+2i_1+i_2+2i_3+i_4+2i_5+2i_6+i_7+i_8-i_9 \\ \frac{K+js+2ss+j_1}{2} \end{bmatrix}} \; \sum_{i_{10}=\max\begin{bmatrix} ss-i_3+i_4-i_8+i_9 \\ m-n+ss+i_3+i_4+i_6+i_9+j_1 \\ 0 \end{bmatrix}}^{\min\begin{bmatrix} L-js+ns-ss+i_3+i_4+i_6-i_9 \\ m+n+ss-i_3-i_4-i_6+i_9-j_2 \\ \frac{L-js+m+n+ns-j_2}{2} \end{bmatrix}} \\
& \times \sum_{i_9=0}^{\left[\frac{L-js-m+n+ns-2ss-j_1}{2}\right]} \; \sum_{i_8=\max\begin{bmatrix} -m-n+2i_4+i_6+j_2 \\ 0 \end{bmatrix}}^{(n-m-j_1-2i_3-i_6)} \; \sum_{i_7=\max\begin{bmatrix} 2i_2+i_5-j_2 \\ 0 \end{bmatrix}}^{(j_1-2i_1-i_5)} \; \sum_{i_6=0}^{\min\begin{bmatrix} n-m-j_1-2i_3, \\ n+m-j_2-2i_4 \end{bmatrix}} \; \sum_{i_5=0}^{\min\begin{bmatrix} j_1-2i_1, \\ j_2-2i_2 \end{bmatrix}} \; \sum_{i_4=0}^{\left[\frac{n+m-j_2}{2}\right]} \\
& \times \sum_{i_3=0}^{\left[\frac{n-m-j_1}{2}\right]} \; \sum_{i_2=0}^{\left[\frac{j_2}{2}\right]} \sum_{i_1=0}^{\left[\frac{j_1}{2}\right]} (-1)^{L+K+ns-ss+i_2+i_4+i_7+i_8-i_9-i_{11}} \; 2^{2(L+K)+2ns+3i_1+i_2+3i_3+i_4+4i_5+4i_6+2i_7+2i_8-3i_9-i_{10}-3i_{11}-i_{12}} \\
& \times \sqrt{C_{i_1}^{2i_1} C_{2i_1}^{j_1}} \sqrt{C_{i_2}^{2i_2} C_{2i_2}^{j_2}} \sqrt{C_{i_3}^{2i_3} C_{2i_3}^{n-m-j_1}} \sqrt{C_{i_4}^{2i_4} C_{2i_4}^{n+m-j_2}} \sqrt{C_{i_5}^{j_1-2i_1} C_{i_5}^{j_2-2i_2}} \\
& \times \sqrt{C_{i_6}^{n-m-j_1-2i_3} C_{i_6}^{n+m-j_2-2i_4}} \sqrt{C_{i_7}^{j_1-2i_1-i_5} C_{i_7}^{j_2-2i_2-i_5+i_7}} \sqrt{C_{i_8}^{n-m-j_1-2i_3-i_6} C_{i_8}^{n+m-j_2-2i_4-i_6+i_8}} \\
& \times \sqrt{C_{i_9}^{2i_9} C_{2i_9}^{L-js-m+n+ns-2ss-j_1}} \sqrt{C_{i_{10}}^{2i_{10}} C_{2i_{10}}^{L-js+m+n+ns-j_2}} \sqrt{C_{-m+n-2i_3-i_6-i_8-j_1}^{-m+n-ss-i_3-i_4-i_6-i_9+i_{10}-j_1} C_{-ss+i_3-i_4+i_8-i_9+i_{10}}^{n+m-j_2-2i_4-i_6+i_8}} \\
& \times \sqrt{C_{L-js+ns-ss+i_3+i_4+i_6-i_9-i_{10}}^{L-js-m+n+ns-2ss-2i_9-j_1} C_{L-js+ns-ss+i_3+i_4+i_6-i_9-i_{10}}^{L-js+m+n+ns-2i_{10}-j_2}} \\
& \times \sqrt{C_{i_{11}}^{2i_{11}} C_{2i_{11}}^{K+js+2ss+j_1}} \sqrt{C_{i_{12}}^{2i_{12}} C_{2i_{12}}^{K+js+j_2}} \sqrt{C_{j_1-2i_1-i_5-i_7}^{ss-i_1-i_2-i_5-i_{11}+i_{12}+j_1} C_{ss+i_1-i_2+i_7-i_{11}+i_{12}}^{j_2-2i_2-i_5+i_7}} \\
& \times \sqrt{C_{K+js+ss+i_1+i_2+i_5-i_{11}-i_{12}}^{K+js+2ss-2i_{11}+j_1} C_{K+js+ss+i_1+i_2+i_5-i_{11}-i_{12}}^{K+js-2i_{12}+j_2}} \, I_{L+K+1-m+n+ns+2i_2+2i_4+i_5+i_6-i_7-i_8}^{L+K+ns+2i_1+i_2+2i_3+i_4+2i_5+2i_6+i_7+i_8-i_9-i_{11}}(r),
\end{aligned}
$$

với $H = 1, 2, 3, \ldots, 9;\ L = -1, 0, 1;\ K = -1; 0; 1.$

Trong đó

$$C_k^n = \frac{n!}{k!(n-k)!}, \qquad n \ge 0, \quad k \le 0, \quad k \le n,$$

$$I_b^a(r) = \int_0^{+\infty} \frac{(r^2)^a}{(1+4r^2)^b}\, dr = \frac{2^{-2(1+a)}\Gamma\left(\frac{1}{2}+a\right)\Gamma\left(-\frac{1}{2}-a+b\right)}{\Gamma(b)}, \quad (a-b \le -1,\ a \ge -0).$$