TẠP CHÍ KHOA HỌC
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM TP HỒ CHÍ MINH
Tập 21, Số 7 (2024): 1229-1240
Website: https://journal.hcmue.edu.vn
ISSN: 2734-9918

HO CHI MINH CITY UNIVERSITY OF EDUCATION
JOURNAL OF SCIENCE
Vol. 21, No. 7 (2024): 1229-1240
https://doi.org/10.54607/hcmue.js.21.7.4210(2024)

Bài báo nghiên cứu

EXCITON TRONG ĐƠN LỚP PHỐT-PHO ĐEN BẤT ĐẲNG HƯỚNG KHI CÓ MẶT CỦA TỪ TRƯỜNG – TIẾP CẬN ĐẠI SỐ

Lê Đỗ Đăng Khoa*, Lê Hoàng Việt, Lê Quang Huy, Lê Văn Hoàng
Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam
**Tác giả liên hệ: Lê Đỗ Đăng Khoa – Email: khoale0412@gmail.com*
Ngày nhận bài: 06-4-2024; ngày nhận bài sửa: 12-5-2024; ngày duyệt đăng: 21-5-2024

TÓM TẮT

Exciton trong vật liệu bán dẫn đơn lớp đang được quan tâm rộng rãi do các ứng dụng quan trọng trong quang điện tử. Phương pháp đại số tiếp cận vấn đề này đã được phát triển cho exciton trong vật liệu đơn lớp chalcogen đôi kim loại chuyển tiếp với nhiều kết quả quan trọng. Trong công trình này, chúng tôi tiếp tục phát triển cách tiếp cận đại số đó cho exciton trong một loại vật liệu đơn lớp khác, có cấu trúc bất đẳng hướng, là phốt-pho đen. Bài toán này có cấu trúc phức tạp hơn, tuy nhiên chúng tôi đã xây dựng được biểu diễn đại số cho phương trình Schrödinger qua các toán tử sinh hủy lượng tử, sau đó xây dựng bộ hàm sóng cơ sở và thu được biểu thức giải tích cho các yếu tố ma trận với bộ hàm cơ sở này. Kết hợp với tính toán đại số, lí thuyết nhiễu loạn có điều tiết được áp dụng cho bài toán khi có mặt từ trường, cho kết quả phù hợp với tính toán của phương pháp khác mặc dù mới tính đến gần đúng bậc không. Kết quả này là một bước quan trọng, thúc đẩy việc áp dụng phương pháp đại số cho exciton hai chiều bất đẳng hướng ở các bậc cao hơn trong các công trình tiếp theo.

Từ khoá: phương pháp đại số; bất đẳng hướng; toán tử sinh hủy; exciton; đơn lớp phốt-pho đen; lí thuyết nhiễu loạn có điều tiết

1. Giới thiệu

Thành công của việc tổng hợp graphene và ứng dụng (Geim & Grigorieva, 2013) đã dẫn đến sự phát triển nhanh chóng các vật liệu hai chiều (2D) khác với nhiều tính chất mới về quang, điện, hứa hẹn nhiều ứng dụng mới. Các vật liệu đơn lớp có nhiều loại, liệt kê như sau: mobyldenum disulfide (MoS2), mobyldenum diselenide (MoSe2), tungsten disulfide (WS2), tungsten diselenide (WSe2), hexagonal boron nitride (h-BN), borophene (2D boron), silicene (2D silicon), germanene (2D germanium), và MXenes (2D carbides/ nitrides) (Arora, 2021). Đặc biệt, exciton trong các đơn lớp bán dẫn chalcogen đôi kim loại chuyển tiếp (Transition-metal dichalcogenide – TMDC) bao gồm WS2, WSe2, MoS2, MoSe2 được

Cite this article as: Le Do Dang Khoa, Le Hoang Viet, Le Quang Huy, & Le Van Hoang (2024). Anisotropic exciton in two-dimentional blackphosphorus in a uniform magnetic field: An algebra approach. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science, 21*(7), 1229-1240.

nghiên cứu rộng rãi trong thời gian qua (Hill et al., 2015; Wang et al., 2018). Trong đó, cách tiếp cận đại số trong các công trình (Nguyen et al., 2019; Ly et al., 2023) có ưu thế, cho phép đưa ra các biểu thức giải tích chính xác cho các yếu tố ma trận, từ đây tiết kiệm rất lớn tài nguyên tính toán. Ngoài ra, cách đưa vào tham số tự do cho phép điều tiết tốc độ hội tụ của các bổ chính phương pháp nhiễu loạn, cho phép thu được lời giải có độ chính xác cao ở bổ chính bậc thấp (Nguyen et al., 2019; Ly et al., 2022). Điều này gợi ý cho việc tiếp tục phát triển phương pháp đại số cho các vật liệu bán dẫn đơn lớp loại khác với TMDC.

Phốt-pho đen (Black Phosphorus – BP) là dạng phốt-pho ổn định nhiệt động ở nhiệt độ và áp suất phòng. Nó thu được bằng cách nung nóng phốt-pho trắng dưới áp suất cao lên đến 12.000 atm. Về ngoại hình, tính chất và cấu trúc, BP rất giống than chì vì cả hai đều có màu đen và dễ bong. BP là một chất dẫn điện và có các nguyên tử liên kết với nhau theo từng lớp (Avsar et al., 2015). Các loại hạt và chuẩn hạt như photon, electron, phonon, exciton trong cấu trúc BP hoạt động theo nguyên lí dị hướng cao trong mặt phẳng của các lớp, thể hiện tiềm năng mạnh mẽ của BP cho các ứng dụng điện tử màng mỏng và quang điện tử hồng ngoại (Li et al., 2014; Prada et al., 2015). Đặc biệt, trong thời gian gần đây, exciton trong đơn lớp BP (Kezerashvili et al., 2022; Wu. 2022) cũng như các loại vật liệu bất đẳng hướng khác (Li et al., 2020) được quan tâm nghiên cứu.

Trong công trình này, chúng tôi nghiên cứu về exciton trong vật liệu đơn lớp BP. Khác với TMDC (có cấu tạo đẳng hướng), đơn lớp BP có cấu tạo dạng tổ ong gấp nếp dẫn đến tính bất đối xứng cao. Do vậy, khi xây dựng Hamiltonian cho exciton, ta phải xét đến sự bất đẳng hướng này: khối lượng hiệu dụng của exciton trên phương Ox và Oy là khác nhau. Tương tác giữa điện tử và lỗ trống tăng đáng kể khi số chiều giảm, tuy nhiên năng lượng của trạng thái kích thích cao vẫn rất khó đo trong thực nghiệm vì thế người ta thường tìm cách đặt trường ngoài như điện trường và từ trường vào để dễ dàng quan sát các vạch phổ. Chúng tôi sẽ xây dựng phương trình Schrödinger cho exciton bất đẳng hướng với sự có mặt của từ trường. Việc tách chuyển động khối tâm trong trường hợp này không phải là bài toán tầm thường nhưng có thể tiến hành nhờ phép biến đổi unita sử dụng vector giả động lượng. Mục tiêu chính của bài báo là xây dựng cơ sở cho phương pháp tính toán đại số. Tuy nhiên, để thấy được hiệu quả của phương pháp, chúng tôi tính năng lượng một số trạng thái thấp bằng lí thuyết nhiễu loạn gần đúng bậc không và so sánh với kết quả công trình khác.

2. Phương pháp lí thuyết

2.1 Xây dựng Hamiltonian cho chuyển động tương đối electron-lỗ trống

Ở bài toán này, xét một exciton trung hoà bao gồm một điện tử tương tác với một lỗ trống thông qua thế năng $\hat{V}_{h-e}(r)$ trong đơn lớp BP. Chuyển động của điện tử và lỗ trống được giới hạn trong mặt phẳng xy hai chiều cùng với sự có mặt của từ trường không đổi $B\mathbf{e}_z$ theo trục Oz vuông góc với mặt phẳng xy. Sau khi đưa về toạ độ khối tâm và chuyển động tương đối, Hamiltonian của hệ như sau:

$$\begin{aligned}\hat{H} = &\frac{1}{2M_x}\hat{P}_X{}^2 + \frac{1}{2M_y}\hat{P}_Y{}^2 + \frac{1}{2m_x}\hat{p}_x{}^2 + \frac{1}{2m_y}\hat{p}_y{}^2 + V_K(x,y)\\ &+\frac{eB}{2}\left[-\frac{1}{M_x}y\hat{P}_X + \frac{1}{M_y}x\hat{P}_Y - \frac{1}{M_y}\left(\frac{m_{hy}}{m_{ex}} - \frac{m_{ey}}{m_{hx}}\right)y\hat{p}_x + \frac{1}{M_x}\left(\frac{m_{hx}}{m_{ey}} - \frac{m_{ex}}{m_{hy}}\right)x\hat{p}_y\right.\\ &\left.-\frac{1}{\mu_x}Y\hat{p}_x + \frac{1}{\mu_y}X\hat{p}_y\right] + \frac{e^2B^2}{8}\left[\frac{1}{\mu_y}X^2 + \frac{1}{\mu_x}Y^2 + \frac{1}{M_x{}^2}\left(\frac{m_{hx}{}^2}{m_{ey}} + \frac{m_{ex}{}^2}{m_{hy}}\right)x^2 + \right.\\ &\left.+\frac{1}{M_y{}^2}\left(\frac{m_{hy}{}^2}{m_{ex}} + \frac{m_{ey}{}^2}{m_{hx}}\right)y^2 + \frac{2}{M_x}\left(\frac{m_{hx}}{m_{ey}} - \frac{m_{ex}}{m_{hy}}\right)xX + \frac{2}{M_y}\left(\frac{m_{hy}}{m_{ex}} - \frac{m_{ey}}{m_{hx}}\right)yY\right],\end{aligned} \tag{1}$$

trong đó $(X, Y, \hat{P}_X, \hat{P}_Y)$ và $(x, y, \hat{p}_x, \hat{p}_y)$ lần lượt là tọa độ và vector động lượng khối tâm cũng như chuyển động tương đối điện tử – lỗ trống theo phương Ox, Oy. Ta sử dụng các kí hiệu $m_{hx}, m_{ex}, m_{hy}, m_{ey}$ cho khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống theo chiều Ox và Oy, đồng thời định nghĩa khối lượng toàn phần M_x, M_y và khối lượng rút gọn μ_x, μ_y của exciton như sau:

$$\begin{aligned}&M_x = m_{ex} + m_{hx}, \quad M_y = m_{ey} + m_{hy},\\ &\mu_x = \frac{m_{ex}m_{hx}}{m_{ex} + m_{hx}}, \quad \mu_y = \frac{m_{ey}m_{hy}}{m_{ey} + m_{hy}}.\end{aligned} \tag{2}$$

Có thể thấy rõ trong Hamiltonian, các toạ độ tương đối và khối tâm không tách nhau ra thành từng cụm độc lập, thay vào đó chúng đan xen vào nhau, làm việc tách khối tâm trở thành bài toán không tầm thường. Tương tự như trong công trình (Ly et al., 2023) cho exciton trong đơn lớp TMDC, ta đưa ra định nghĩa véc tơ giả động lượng như sau:

$$\hat{P}_0 = \hat{P} - \frac{1}{2}e\vec{B}\times\vec{r} \tag{3}$$

với các thành phần $\hat{P}_{0X} = \hat{P}_X + \frac{eB}{2}y$ và $\hat{P}_{0Y} = \hat{P}_Y - \frac{eB}{2}x$. Ta dễ dàng tính được hàm riêng của toán tử $\hat{P}_0$ là:

$$\Psi(\vec{R},\vec{r}) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{K} + \frac{1}{2}e\vec{B}\times\vec{r}\right).\vec{R}\right\}\psi(\vec{r}) \tag{4}$$

ứng với trị riêng $\vec{K} = K_X\vec{i} + K_Y\vec{j}$.

Trong biểu thức (4), hàm sóng $\psi(\vec{r})$ là bất kì cho nên ta có thể chọn nó sao cho hàm sóng (4) đồng thời là hàm riêng của Hamiltonian (1). Đem thế (4) vào phương trình Schrödinger với Hamiltonian (1) ta thu được phương trình

$$\hat{H}_{rel}\psi(x,y) = E\psi(x,y) \tag{5}$$

với toán tử $\hat{H}_{rel} = \hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}$, $\hat{U} = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{K} + \frac{1}{2}e\vec{B}\times\vec{r}\right).\vec{R}\right\}$. Sau khi biến đổi, ta thu được dạng tường minh của toán tử Hamilton của phương trình (5) như sau

$$\begin{aligned}\hat{H}_{rel} = &-\frac{\hbar^2}{2\mu_x}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_y}\frac{\partial^2}{\partial y^2} - i\hbar\frac{eB}{2}\left(a_1 x\frac{\partial}{\partial y} - a_2 y\frac{\partial}{\partial x}\right) + V_K(x,y)\\ &+\frac{e^2B^2}{8}\left(\frac{3+d_1}{M_y}x^2 + \frac{3+d_2}{M_x}y^2\right) + eB\left(\frac{1}{M_x}xK_y - \frac{1}{M_y}yK_x\right),\end{aligned} \tag{6}$$

với các hệ số được định nghĩa như sau

$$a_1 = \frac{m_{hx}m_{hy} - m_{ex}m_{ey}}{M_x m_{ey}m_{hy}}, \quad a_2 = \frac{m_{hy}m_{hx} - m_{ey}m_{ex}}{M_y m_{ex}m_{hx}},$$

$$d_1 = \frac{M_y}{{M_x}^2}\frac{{m_{hx}}^2 m_{hy} + {m_{ex}}^2 m_{ey}}{m_{ey}m_{hy}}, \; d_2 = \frac{M_x}{{M_y}^2}\frac{{m_{hy}}^2 m_{hx} + {m_{ey}}^2 m_{ex}}{m_{ex}m_{hx}}.$$

Do $\mu_x \neq \mu_y$ nên trong Hamiltonian (6) có sự bất đẳng hướng.

Hamiltonian (6) không chứa tọa độ khối tâm X, Y mà chỉ có tọa độ chuyển động tương đối x, y, do đó ta có thể nói việc tách chuyển động khối tâm đã thành công. Tiếp theo, vì ta chỉ xét bài toán ở nhiệt độ thấp nên có thể cho $K_x = K_y = 0$ dẫn đến thành phần cuối cùng trong Hamiltonian (6) có thể được bỏ qua. Để cho tiện tính toán ta sử dụng đơn vị nguyên tử, đặt:

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu_x e^2}, \; Ry^* = \frac{\mu_x e^4}{16\pi^2{\varepsilon_0}^2\hbar^2}, \; B = \gamma\mu_x\hbar Ry^*/e \tag{7}$$

với a_0 là đơn vị độ dài, Ry^* là đơn vị năng lượng, γ là cường độ từ trường không thứ nguyên. Khi đó Hamiltonian có dạng không thứ nguyên như sau:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{rel} = &-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\mu_x}{\mu_y}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) - \frac{i\gamma}{2}a_1\mu_x\left(x\frac{\partial}{\partial y} - \frac{a_2}{a_1}y\frac{\partial}{\partial x}\right)\\ &+\frac{\gamma^2}{8}\mu_x\left(\frac{3+d_1}{M_y}x^2 + \frac{3+d_2}{M_x}y^2\right) + V_K(x,y).\end{aligned} \tag{8}$$

2.2. Phương trình qua phép biến đổi Levi-Civita

Tương tự như trong các công trình trước (Nguyen et al., 2019; Ly et al., 2023), phương trình Schrödinger với Hamiltonian (8) cần phải đưa về không gian u, v bằng phép biến đổi Levi-Civita để có thể sử dụng phương pháp đại số cho các tính toán. Tuy nhiên, trước hết ta cần giảm bớt tính dị hướng của Hamiltonian (8) bằng cách biến đổi như sau

$$y \to \sqrt{\frac{\mu_x}{\mu_y}}\, y, \quad x \to x\,. \tag{9}$$

Khi đó, Hamiltonian sẽ được "khử" sự dị hướng ở hai thành phần đầu tiên và tính dị hướng chỉ còn trong các thành phần có chứa tọa độ, làm cho bài toán trở nên đơn giản hơn rất nhiều khi sử dụng phép biến đổi Levi-Civita sau này:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{rel} = &-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)-\frac{i\gamma}{2}a_1\sqrt{\mu_x\mu_y}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\\ &+\frac{\gamma^2}{8}\mu_x\left(\frac{3+d_1}{M_y}x^2+\frac{\mu_x}{\mu_y}\frac{3+d_2}{M_x}y^2\right)+V_K(x,y).\end{aligned} \tag{10}$$

Ở đây, $V_K(x,y)$ là thế năng Keldysh thường được biểu diễn qua hai hàm Bessel bậc không và hàm Struve bậc không (Keldysh, 1979). Tuy nhiên, trong công trình (Nguyen et al., 2019) nó được biểu diễn qua dạng Fourier. Trong bài này, sau khi sử dụng phép biến đổi (9) ta thu được:

$$V_K(x,y) = -\frac{1}{2\pi\kappa}\sqrt{\frac{\mu_y}{\mu_x}}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 dt_2\,\frac{\exp\left(it_1x+it_2y\right)}{t(1+\alpha t)} \tag{11}$$

với $t=\sqrt{t_1^{\,2}+\dfrac{\mu_y}{\mu_x}t_2^{\,2}}$, $\alpha = r_0/\kappa a_0$, r_0 - độ dài chắn, κ hằng số điện môi của môi trường bao quanh tấm vật liệu.

Ta áp dụng phép biến đổi Levi-Civita

$$x = u^2 - v^2, \quad y = 2uv \tag{12}$$

vào phương trình $\hat{H}_{rel}\psi(x,y) = E\psi(x,y)$ để đưa nó về không gian u,v như sau:

$$\hat{H}\psi(u,v) = E\hat{R}\psi(u,v) \tag{13}$$

với $\hat{R} = u^2+v^2$ và toán tử Hamilton $\hat{H}$ (khác với Hamiltonian (1) tuy cùng kí hiệu) có dạng:

$$\begin{aligned}\hat{H} = &-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u^2}+\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right)-\frac{i\gamma}{2}a_1\sqrt{\mu_x\mu_y}\left(u^2+v^2\right)\left(u\frac{\partial}{\partial v}-v\frac{\partial}{\partial u}\right)\\ &+\frac{\delta_1-\delta_2}{8}\gamma^2\left(u^2+v^2\right)\left(u^2-v^2\right)^2+\frac{\delta_2}{8}\gamma^2\left(u^2+v^2\right)^3+V_K(u,v),\end{aligned} \tag{14}$$

với $\delta_1 = \dfrac{(3+d_1)\mu_x}{M_y}$, $\delta_2 = \dfrac{(3+d_2)\mu_x^{\,2}}{\mu_y M_y}$. Thế Keldysh bây giờ có dạng :

$$V_K(u,v) = -\frac{1}{2\pi\kappa}\sqrt{\frac{\mu_y}{\mu_x}}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 dt_2\,\frac{\exp\left[it_1\left(u^2-v^2\right)+2it_2uv\right]}{t(1+\alpha t)}\left(u^2+v^2\right) \tag{15}$$

với $t = \sqrt{t_1^{\,2} + \dfrac{\mu_y}{\mu_x} t_2^{\,2}}$.

2.3 Biểu diễn đại số qua các toán tử sinh hủy lượng tử

Ta xét phương trình (13) với Hamiltonian (14). Các toán tử trong Hamiltonian đều giống như trường hợp exciton trong đơn lớp TMDC, do đó ta có thể sử dụng cách tiếp cận đại số như trong các công trình (Nguyen et al., 2019; Ly et al., 2023). Ta sử dụng các toán tử sinh hủy $\hat{a}, \hat{a}^+, \hat{b}, \hat{b}^+$ được định nghĩa trong các công trình này và sử dụng biểu diễn các toán tử đó như sau:

$$\hat{T} = \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} = \omega\left(\hat{a}\hat{b} + \hat{a}^+\hat{b}^+ - \hat{a}^+\hat{a} - \hat{b}^+\hat{b} - 1\right),$$

$$\hat{R} = u^2 + v^2 = \frac{1}{\omega}\left(\hat{a}\hat{b} + \hat{a}^+\hat{b}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b} + 1\right), \tag{16}$$

$$\hat{x} = u^2 - v^2 = \frac{1}{2\omega}\left(\hat{a}^2 + \hat{a}^{+2} + \hat{b}^2 + \hat{b}^{+2} + 2\hat{a}\hat{b}^+ + 2\,\hat{a}^+\hat{b}\right).$$

$$u\frac{\partial}{\partial v} - v\frac{\partial}{\partial u} = \hat{a}^+\hat{a} - \hat{b}^+\hat{b}$$

Trong đó các toán tử sinh, huỷ $\hat{a},\ \hat{a}^+,\ \hat{b},\ \hat{b}^+$ thoả hệ thức giao hoán sau:

$$\left[\hat{a},\ \hat{a}^+\right] = 1, \quad \left[\hat{b},\ \hat{b}^+\right] = 1 \tag{17}$$

là cơ sở cho các tính toán đại số.

Bây giờ, trước khi xây dựng bộ hàm cơ sở dạng đại số, ta cần lưu ý là Hamiltonian (10) không đối xứng qua phép biến đổi $x \to y,\ y \to x$, do đó moment động lượng của hệ không bảo toàn. Ta cũng có thể kiểm chứng điều này bằng cách chứng minh $\left[\hat{l}, \hat{H}_{rel}\right] \neq 0$, trong đó $\hat{l}$ là toán tử moment động lượng quỹ đạo. Điều đó nghĩa là số lượng tử từ m không còn là số lượng tử tốt, ta không thể sử dụng bộ hàm cơ sở $\left|n, m, \omega\right\rangle$ với giá trị m cố định như trong các công trình (Nguyen et al., 2019; Ly et al 2023). Do vậy, ta sử dụng bộ hàm cơ sở như sau

$$\left|n_1, n_2, \omega\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!\,n_2!}} = (\hat{a}^+)^{n_1}(\hat{b}^+)^{n_2}\left|0(\omega)\right\rangle \tag{18}$$

với trạng thái chân không được định nghĩa bằng các phương trình:

$$\hat{a}\left|0(\omega)\right\rangle = 0,\ \hat{b}\left|0(\omega)\right\rangle = 0, \quad \left\langle 0(\omega)\middle|0(\omega)\right\rangle = 1. \tag{19}$$

Sử dụng hệ thức giao hoán (17) và các phương trình cho trạng thái chân không (19) ta có thể tính tất cả các yếu tố ma trận của các toán tử trong (16), ví dụ

$$T_{n_1 n_2} = \frac{1}{\omega}\left\langle n_1 n_2 \omega\middle|\hat{T}\middle|n_1 n_2 \omega\right\rangle = -(n_1 + n_2 + 1),$$

$$R_{n_1n_2} = \omega\left\langle n_1 n_2 \omega \middle| \hat{R} \middle| n_1 n_2 \omega \right\rangle = n_1 + n_2 + 1, \tag{20}$$

và từ đó ta có thể tính yếu tố ma trận của toán tử Hamiltonian $\hat{H}$, phục vụ cho các tính toán giải phương trình Schrödinger.

3. *Năng lượng exciton trong đơn lớp phốt-pho đen khi có mặt từ trường*

3.1 Lí thuyết nhiễu loạn với gần đúng bậc không

Do sử dụng phép biến đổi Levi-Civita, phương trình Schrödinger (13) không còn dạng bình thường mà thêm toán tử $\hat{R}$ vào cùng năng lượng E. Tuy nhiên, điều này không làm khó việc xây dựng lí thuyết nhiễu loạn. Đầu tiên ta tách Hamiltonian thành hai phần như sau:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \beta \hat{V}, \qquad \hat{R} = \hat{R}_0 + \beta \hat{R}_V. \tag{21}$$

trong đó, thành phần $\hat{H}_0$ và $\hat{R}_0$ chỉ chứa những toán tử trung hòa, phần còn lại là các toán tử $\hat{V}$ và $\hat{R}_V$ có thể xem là phần nhiễu loạn. Hệ số nhiễu loạn β chỉ mang tính hình thức, nó không ảnh hưởng đến kết quả cuối cùng khi ta cho $\beta = 1$. Ta tiếp tục tìm năng lượng và hàm sóng theo dạng chuỗi của β như sau:

$$\begin{aligned} E_{n_1n_2} &= E^{(0)}_{n_1n_2} + \beta\,\Delta E^{(1)}_{n_1n_2} + \beta^2\,\Delta E^{(2)}_{n_1n_2} + \ldots \\ \psi_{n_1n_2} &= \psi^{(0)}_{n_1n_2} + \beta\,\Delta\psi^{(1)}_{n_1n_2} + \beta^2\,\Delta\psi^{(2)}_{n_1n_2} + \ldots \end{aligned} \tag{22}$$

Đem (22) thế vào phương trình (13), ta dễ dàng thu được phương trình cho từng thành phần năng lượng và hàm sóng bậc không $E^{(0)}_{n_1n_2}, \psi^{(0)}_{n_1n_2}$ cùng các bổ chính $\Delta E^{(1)}_{n_1n_2}, \Delta E^{(2)}_{n_1n_2}, \ldots$ và $\Delta\psi^{(1)}_{n_1n_2}, \Delta\psi^{(2)}_{n_1n_2}, \ldots.$

Ở đây, ta quan tâm đến bậc không với hàm sóng $\psi^{(0)}_{n_1n_2} = \left| n_1, n_2, \omega \right\rangle$ chính là hàm cơ sở (18) với năng lượng bậc không

$$E^{(0)}_{n_1n_2} = \frac{h_{n_1n_2}}{r_{n_1n_2}}, \tag{23}$$

trong đó, các yếu tố ma trận $h_{n_1n_2} = \left\langle n_1 n_2 \middle| \hat{H} \middle| n_1 n_2 \right\rangle$ và $r_{n_1n_2} = \left\langle n_1 n_2 \middle| \hat{R} \middle| n_1 n_2 \right\rangle = R_{n_1n_2,n_1n_2}$ dễ dàng thu được từ các công thức yếu tố ma trận (20) và tương tự khi cho $j_1 j_2 = n_1 n_2$. Ta thu được

$$E^{(0)}_{n_1n_2} = \frac{1}{8}\omega^2 - \frac{\gamma a_1\sqrt{\mu_x\mu_y}}{4}\left(n_1 - n_2\right) + \frac{\gamma^2}{32\omega^2}\left[4\delta_2 R^3_{n_1n_2} + (\delta_1 - \delta_2)P_{n_1n_2}\right] + V_{n_1n_2}(\omega) \tag{24}$$

với các kí hiệu:

$$R^3_{n_1n_2} = \frac{\left\langle n_1 n_2 \middle| \hat{R}^3 \middle| n_1 n_2 \right\rangle}{r_{n_1n_2}} = \frac{5}{2}(n_1 + n_2)(n_1 + n_2 + 2) - \frac{3}{2}(n_1 - n_2)^2 + 6$$

$$P_{n_1n_2} = (n_1+1)(n_1+2)(n_1+3n_2+3) + n_1(n_1-1)(2n_2+1)$$
$$+ (n_2+1)(n_2+2)(3n_1+n_2+3) + n_2(n_2-1)(3n_1+n_2+1)$$
$$+ 6n_2(n_1+1)(n_1+n_2+1) + 6n_1(n_2+1)$$

$$V_{n_1n_2}(\omega) = \frac{\langle n_1n_2|\hat{V}_K|n_1n_2\rangle}{r_{n_1n_2}} = -\frac{1}{2\pi\kappa(n_1+n_2+1)}$$
$$\times\sqrt{\frac{\mu_y}{\mu_x}}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} dt_1dt_2\,\frac{1}{t(1+2\omega\alpha t)}\Big\{(n_1+n_2+1)O_{n_1n_2}$$
$$+\sqrt{n_1n_2}\,O_{n_1-1,n_2-1}+\sqrt{(n_1+1)(n_2+1}\,O_{n_1+1,n_2+1}\Big\},$$

$$O_{n_1+s,n_2+s} = \sum_{p=0}^{\left[\frac{n_1}{2}\right]}\sum_{q=0}^{\left[\frac{n_2}{2}\right]}\sum_{p_1=0}^{\left[\frac{n_1+s}{2}\right]}\sum_{q_1=0}^{\left[\frac{n_2+s}{2}\right]}\sum_{h=\max\left(\substack{q+p,\\ q_1+p_1-s}\right)}^{\min\left(\substack{n_2-q+p,\\ n_1+q-p,\\ n_2-q_1+p_1,\\ n_1+q_1-p_1}\right)}\sum_{l=\max\left(\substack{q+p_1,\\ p+q_1}\right)}^{n_2+p+p_1-h}\frac{1}{2^{q+q_1+p+p_1}q!q_1!p!p_1!}$$
$$\times\frac{\sqrt{n_1!n_2!(n_1+s)!(n_2+s)!}}{(h+s-q_1-p_1)!(h-q-p)!(l-q-p_1)!(l-p-q_1)!}$$
$$\times\frac{(n_1-p-p_1-h+l)!}{(n_1+q_1-p_1-h)!(n_1+q-p-h)!(n_2+p_1+p-h-l)!}$$
$$\times\frac{(-4t^2)^{s+2h+l-q-p-q_1-p_1}}{(1+4t^2)^{n_1+s+h+l-p-p_1+1/2}}.$$

3.2. Kết quả tính số

Ta thấy khi định nghĩa các toán tử sinh hủy và xây dựng bộ hàm cơ sở (18), ta có đưa vào một tham số ω. Tham số tự do ω có vai trò điều tiết, tham số này không làm ảnh hưởng đến kết quả cuối cùng mà chỉ đóng vai trò làm tăng tốc độ hội tụ của bài toán, giúp chúng ta mở rộng mô hình tính toán mà không cần phải có điều kiện tham số đủ nhỏ. Các công trình trước đây (Feranchuk et al., 2015) đã chỉ ra một cách xác định giá trị của tham số này là lấy đạo hàm riêng của biểu thức năng lượng bậc không sau đó cho nó bằng không với ý nghĩa là năng lượng không phụ thuộc vào tham số ω.

$$\frac{\partial E_{nm}^{(0)}}{\partial\omega} = 0\,. \tag{25}$$

Đây là gần đúng nhưng cho năng lượng gần đúng bậc không có giá trị khá chính xác.

Chúng tôi tính toán năng lượng bổ chính bậc không dựa vào biểu thức (24) vừa thu được bên trên. Sử dụng ngôn ngữ lập trình Python chúng tôi phát triển chương trình tính toán năng lượng, kết quả thu được có giá trị phù hợp với những công trình khác, ví dụ như mức năng lượng cơ bản khi không có từ trường ($B = 0$) chỉ sai khoảng 5,1% so với công

trình (Wu, 2022), sai số khoảng 1,7% đối với trạng thái (01). Mọi thông số cấu trúc của BP cũng được tham khảo từ công trình đó và được thể hiện ở Bảng 1.

Bảng 1. *Các thông số của BP (m_e - khối lượng electron)*

$m_{ex}(m_e)$	$m_{hx}(m_e)$	$m_{ey}(m_e)$	$m_{hy}(m_e)$	κ	$r_0(nm)$
0,15	0,16	1,24	4,92	1,0	2,576

Bảng 2. *Năng lượng của exciton trong từ trường cho các trạng thái:* (00), (11), (22)

B(Tesla)	$E_{00}^{(0)}$ (meV)	$E_{11}^{(0)}$ (meV)	$E_{22}^{(0)}$ (meV)
0	-712,6	-322,3	-189,2
1	-712,5	-322,2	-189,2
5	-712,5	-322,2	-189,1
10	-712,5	-322,2	-189,0
15	-712,5	-322,1	-188,8
20	-712,5	-322,1	-188,5
50	-712,4	-321,1	-185,3
100	-711,9	-317,9	-174,8
200	-709,8	-305,7	-139,6
300	-706,3	-287,3	-93,0
400	-701,6	-264,0	-39,6
500	-695,7	-237,2	18,0

Bảng 3. *Năng lượng của exciton trong từ trường cho các trạng thái :* (01), (02), (03)

B(Tesla)	$E_{01}^{(0)}$ (meV)	$E_{02}^{(0)}$ (meV)	$E_{03}^{(0)}$ (meV)
0	-500,2	-375,8	-293,5
1	-500,1	-375,7	-293,3
5	-500,0	-375,4	-292,9
10	-499,8	-375,0	-292,4
15	-499,6	-374,7	-291,8
20	-499,5	-374,3	-291,2
50	-499,1	-371,7	-287,2
100	-495,3	-366,2	-298,0
200	-487,3	-351,0	-293,2
300	-476,5	-331,0	-281,2
400	-463,1	-307,1	-263,9
500	-447,5	-280,0	-242,8

Bảng 4. *Năng lượng của exciton trong từ trường cho các trạng thái:* $(10), (20), (30)$

B(T)	$E_{10}^{(0)}$ (meV)	$E_{20}^{(0)}$ (meV)	$E_{30}^{(0)}$ (meV)
0	-500,2	-375,7	-293,4
1	-500,2	-375,8	-293,5
5	-500,3	-376,0	-293,9
10	-500,5	-376,4	-294,3
15	-500,6	-376,7	-294,8
20	-500,8	-377,0	-295,2
50	-501,4	-378,3	-297,0
100	-501,8	-379,2	-298,0
200	-500,3	-376,8	-293,1
300	-495,9	-369,4	-281,1
400	-488,9	-358,0	-263,9
500	-479,6	-343,4	-242,8

4. Kết luận

Chúng tôi đã xây dựng thành công phương trình Schrödinger dưới dạng đại số cho exciton trong đơn lớp bất đẳng hướng phốt-pho đen với sự có mặt từ trường. Các yếu tố ma trận của các toán tử trong Hamiltonian được tính dưới dạng tường minh, thuận lợi cho các tính toán số cũng như phân tích giải tích. Để minh họa, năng lượng của exciton cho một vài trạng thái kích thích thấp được tính bằng lí thuyết nhiễu loạn có điều tiết ở gần đúng bậc không. Trên cơ sở đó, đã phát triển chương trình tính toán phổ năng lượng dùng ngôn ngữ lập trình Python. Kết quả cho thấy kết quả đáng tin cậy phù hợp với tính toán khác. Đây là cơ sở cho những nghiên cứu tiếp theo về năng lượng exciton trong môi trường dị hướng, cho bài toán tìm nghiệm chính xác bằng số và xa hơn nữa là tìm nghiệm giải tích cho bài toán này.

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

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Arora, A. (2021). Magneto-optics of layered two-dimensional semiconductors and heterostructures: Progress and prospects. *J. Appl. Phys. 129*, 120902.

Avsar, A., Vera-Marun, I. J., Tan J. Y., Watanabe, K., Taniguchi, T., Castro Neto, A. H., & Ozyilmaz B. (2015). Air-stable transport in graphene-contacted, fully encapsulated ultrathin black phosphorus-based field- effect transistors. *ACS Nano 9*, 4138.

Feranchuk, I., Ivanov, A., Le, V. H., & Ulyanenkov, A. (2015). *Non-perturbative Description of Quantum Systems* (Vol. 894). Cham: Springer International Publishing.

Geim, A. K. & Grigorieva, I. V. (2013). Van der Waals heterostructures. *Nature (London), 499*, 419.

Hill, H. M., Rigosi, A. F., Roquelet, C., Chernikov, A., Berkelbach, T. C., Reichman, D. R., Hybertsen, M. S., Brus, L. E., & Heinz, T. F. (2015). Observation of excitonic Rydberg states in monolayer MoS2 and WS2 by photoluminescence excitation spectroscopy. *Nano Lett., 15*, 2992.

Keldysh, L. V. (1979). Coulomb interaction in thin semiconductor and semimetal films. *JETP Lett.,* 29, 658.

Kezerashvili, R. Y., Spiridonova, A., & Andrew Dublin, A. (2022). Magnetoexcitons in phosphorene monolayers, bilayers, and van der Waals heterostructures. *Phys. Rev. Research, 4*, 013154.

Li, J., Ma, J., Cheng, X., Liu, Z., Chen, Y, & Li, D. (2020). Anisotropy of excitons in two-dimensional perovskite crystals. *ACS Nano 14*, 2156.

Li, L., Yu, Y., Ye, G. J., Ge, Q., Ou, X., Wu, H., Feng, D., Chen, X. H., & Zhang, Y. (2014). Black phosphorus field-effect transistors. *Nature Nanotech, 9*, 372.

Ly, D. N., Le, D. N., Phan, N. H., & Le, V. H. (2023). Thermal effect on magnetoexciton energy spectra in monolayer transition metal dichalcogenides. *Phys. Rev. B., 107*, 155410.

Ly, D. N., Huynh, N. T. T., Nguyen, L. H. M., Nguyen, N. Q., Doan, P. T., & Phan, N. H. (2022). Regulated perturbation theory for neutral exciton energy in a uniform magnetic field. *Ho Chi Minh City University Journal of Science, 19(3)*, 399-410.

Nguyen, P. D. A., Ly D. N., Le D. N., Hoang, D. N. T., & 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, 113*, 152.

Prada, E., Alvarez, J., Narasimha-Acharya, K., Bailen, F., & Palacios, J. (2015). Effective-mass theory for the anisotropic exciton in two-dimensional crystals: Application to phosphorene. *Phys. Rev. B 91*, 245421.

Wang, G., Chernikov, A., Glazov, M. M., Heinz, T. F., Marie, X., Amand, T., & Urbaszek, B. (2018). Colloquium: Excitons in atomi- cally thin transition metal dichalcogenides. *Rev. Mod. Phys. 90*, 021001.

Wu, S. (2022). Anisotropic exciton states and excitonic absorption spectra in a freestanding monolayer black phosphorus. *Physica E, 141*, 115238.

ANISOTROPIC EXCITON IN TWO-DIMENTIONAL BLACKPHOSPHORUS IN A UNIFORM MAGNETIC FIELD: AN ALGEBRA APPROACH

Le Do Dang Khoa*, Le Hoang Viet, Le Quang Huy, Le Van Hoang

Ho Chi Minh City University of Education, Vietnam

**Corresponding author: Le Do Dang Khoa – Email: khoa.nd@vlu.edu.vn*

Received: April 06, 2024; Revised: May 12, 2024; Accepted: May 21, 2024

ABSTRACT

Exciton in monolayer semiconductor materials is of widespread interest due to their important applications in optoelectronics. An algebraic approach has been developed for excitons in monolayer transition-metal dichalcogenides with critical results. The present work extends this algebraic approach to excitons in another conductive material with an anisotropic structure: monolayer black phosphorus. This problem presents a more complex structure; however, we have developed an algebraic representation of the Schrödinger equation using quantum creation and annihilation operators. A basis set of wave functions was constructed, allowing us to derive analytical matrix elements related to these basis functions. By combining these results with algebraic calculations, we applied regulated perturbation theory in the presence of a magnetic field, achieving results consistent with other calculations, even at the zero-approximation order. These results are a critical step toward applying the algebraic method to anisotropic two-dimensional excitons in higher-approximation orders in future studies.

Keyword: algebraic method; anisotropy; annihilation and creation operators; exciton; monolayer black phosphorus; regulated perturbation theory