

Bài báo nghiên cứu

NGHIÊN CỨU EXCITON TRUNG HÒA TRONG ĐƠN LỚP DICHALCOGENIDE KIM LOẠI-CHUYỂN TIẾP ĐẶT TRONG TỪ TRƯỜNG ĐỀU BẰNG PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ

Lê Hữu Đức, Trần Vĩnh Phát, Lý Duy Nhất*

Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

*Tác giả liên hệ: Lý Duy Nhất – Email: nhatld@hcmue.edu.vn

Ngày nhận bài: 30-8-2024; Ngày nhận bài sửa: 23-10-2024; Ngày duyệt đăng: 05-8-2025

TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, chúng tôi giới thiệu một phương pháp phân tích hiệu quả để giải phương trình Schrödinger cho hệ exciton trung hòa trong từ trường đều. Cách tiếp cận được xây dựng dựa trên việc kết hợp linh hoạt giữa phương pháp toán tử FK (Feranchuk-Komarov) truyền thống với phép biến đổi Fourier trực tiếp trong không gian (x, y) . Phương pháp này không chỉ thân thiện với các thiết kế thực nghiệm mà còn rất triển vọng cho bài toán nguyên tử hai electron như bài toán trion trong đơn lớp TMDs. Chúng tôi đã thu được năng lượng giải tích bậc 0 theo từ trường đều có cường độ bất kỳ với độ lệch dưới 0.6% so với công trình khác. Đồng thời, năng lượng bằng số cũng được tính với độ chính xác 10^{-6} , kết quả phù hợp với công trình khác với độ lệch trung bình 0.03% khi hàm sóng được ngắt chuỗi đến 30 số hạng khai triển. Bên cạnh đó, chúng tôi đã xây dựng chương trình tính toán bằng ngôn ngữ FORTRAN, áp dụng lập trình song song MPI (Message Passing Interface) cho việc tính các yếu tố ma trận và giải phương trình trị riêng, vector riêng. Điều này giúp cải thiện thời gian tính toán cho bài toán nguyên tử một electron, đồng thời mở ra khả năng mở rộng phương pháp cho các bài toán trion.

Từ khóa: toán tử sinh-hủy hạt; bộ hàm cơ sở; exciton; phép biến đổi Fourier; phương pháp toán tử; trion; hệ nguyên tử hai chiều

1. Giới thiệu

Exciton là giả hạt tồn tại bởi sự liên kết hình thành khi electron và lỗ trống hút nhau trong tinh thể bán dẫn, và đóng vai trò quan trọng trong các hệ hai chiều như đơn lớp TMDs (Transition Metal Dichalcogenides) (Molas et al., 2019). Các giả hạt này được tạo thành bởi tương tác Coulomb do hiệu ứng chắn mạnh làm rã exciton trong môi trường điện môi và bị giam giữ lượng tử trong không gian giới hạn vốn có trong vật liệu hai chiều (2D) và thể Keldysh hay Kratzer có thể dùng mô tả gần đúng nhất tương tác này (Molas et al., 2019; Stier et al., 2018). Phổ năng lượng thực nghiệm của exciton trong đơn lớp TMDs bị lệch

Cite this article as: Le, H. D., Tran, V. P., & Ly, D. N. (2026). Neutral excitons in transition metal dichalcogenide monolayers under a homogeneous magnetic field: An operator-based approach. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 23(1), 138-149. [https://doi.org/10.54607/hcmue.js.23.1.4463\(2026\)](https://doi.org/10.54607/hcmue.js.23.1.4463(2026))

hiều, đặc biệt ở mức cơ bản, so với kết quả tính từ mô hình lí thuyết của nguyên tử hydro thông thường, khiến chúng được nhiều sự quan tâm, đặc biệt đối với lĩnh vực quang điện tử. Do đó, có nhiều công trình nghiên cứu tiến hành khảo sát tính chất độc đáo này với nhiều mô hình lí thuyết và kĩ thuật tiên tiến được sử dụng trong thực nghiệm (Liu et al., 2019, 2021; Ly et al., 2023a; Ly et al., 2023b; Molas et al., 2019; Stier et al., 2018).

Exciton ảnh hưởng trực tiếp đến các tính chất quang học của vật liệu bởi sự hình thành và tiêu biến của nó nên góp phần vào các quá trình hấp thụ và phát xạ ánh sáng để tạo ra phổ năng lượng đặc trưng. Việc nghiên cứu phổ năng lượng của exciton giúp ta hiểu sâu hơn về cấu trúc và các đặc tính của vật liệu, từ đó có thể áp dụng vào các thiết bị quang học (Hernandez-Rueda et al., 2021). Các nghiên cứu cho thấy rằng, trong các đơn lớp TMDs, phổ hấp thụ của exciton có cấu trúc rõ nét, cho phép thực hiện các phân tích chi tiết về mặt lí thuyết và thực nghiệm. Tuy nhiên, các mức năng lượng kích thích của exciton rất gần nhau và phổ lại mờ hơn mức cơ bản, khiến cho việc thu thập số liệu thực nghiệm trở nên khó khăn. Để giải quyết vấn đề này, đơn lớp TMDs được kẹp bởi chất nền hBN (hexagonal boron nitride) giúp cho mức năng lượng kích thích rõ nét hơn. Hơn nữa, phổ năng lượng exciton thường được đo trong từ trường đều để các mức năng lượng tách ra xa nhau nhằm thuận lợi cho việc phân tích quang phổ (Hernandez-Rueda et al., 2021; Stier et al., 2018). Nghiên cứu phổ năng lượng của exciton trong từ trường không chỉ giúp chúng ta hiểu rõ hơn về các hiệu ứng và tính chất quang của hệ bán dẫn dưới tác dụng của từ trường mà còn giúp truy xuất thông tin cấu trúc vật liệu bằng việc so sánh phổ năng lượng thực nghiệm và lí thuyết (Liu et al., 2019; Ly et al., 2023a; Stier et al., 2018).

Hơn nữa, bài toán exciton trung hòa rất quan trọng là tiền đề để phát triển bài toán phức tạp hơn, ví dụ như bài toán trion (exciton âm) đặt trong từ trường đều. Về mặt lí thuyết, để giải nghiệm bài toán trion, ta cần giải quyết triệt để cho bài toán exciton trung hòa đồng thời tính yếu tố ma trận cho thế tương tác giữa hai electron $V_{e-e}(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$. Về mặt thực nghiệm, phổ năng lượng exciton trung hòa thường đan xen với phổ năng lượng trion bởi vì độ lệch hai mức cơ bản của exciton trung hòa và trion chỉ vào khoảng 30 meV (Sayer et al., 2023). Như vậy, nghiên cứu phổ năng lượng, hàm sóng của exciton trung hòa trong đơn lớp TMDs đặt trong từ trường đều bằng phương pháp triển vọng để phát triển cho bài toán trion là rất quan trọng, có tính thời sự và cấp thiết.

Việc giải phương trình Schrödinger để tìm phổ năng lượng và các hàm sóng của exciton trung hòa hai chiều trong từ trường được nhiều nhóm nghiên cứu quan tâm từ những vài chục năm trước và cũng là chủ đề nóng được quan tâm trong những năm gần đây. Các công trình quan trọng có thể kể như (Hoang et al., 2020; Liu et al., 2021; Ly et al., 2023a; Molas et al., 2019; Nguyen et al., 2019; Shah et al., 1977; Stier et al., 2016, 2018). Trong số các phương pháp giải số phương trình Schrödinger, phương pháp toán tử FK (FK-OM) đã đạt được những thành công trong việc tìm nghiệm chính xác và hội tụ cho bài toán exciton trung hòa trong từ trường đều với cường độ bất kì bằng cách kết hợp với phép biến đổi Levi-Civita (Ly et al., 2023a; Ly et al., 2023b; Nguyen et al., 2019). Trong công trình (Ly et al., 2023a; Ly et al., 2023b), lần đầu tiên thế Keldysh được biểu diễn bằng tích phân Laplace,

nhờ đó yếu tố ma trận của Hamiltonia có thể tìm được bằng biểu thức giải tích thay vì phải tính số như các phương pháp khác. Các công trình áp dụng phương pháp FK luôn thu được nghiệm số chính xác cao đến 20 chữ số thập phân nhờ điều chỉnh tham số tự do ω , một tham số có vai trò quan trọng giúp cho nghiệm số hội tụ nhanh và tiết kiệm tài nguyên máy tính. Tuy nhiên, việc áp dụng phương pháp toán tử kết hợp phép biến đổi Levi-Civita cũng gặp khó khăn nhất định. Việc kết hợp phép biến đổi Levi-Civita trong phương pháp FK là nhằm triệt tiêu $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ ở mẫu số, từ đó giúp dễ dàng chuyển Hamiltonian về dạng các toán tử sinh, hủy. Tuy nhiên, điều này chỉ hiệu quả trong trường hợp bài toán một electron, trong trường hợp bài toán hệ nhiều electron, ví dụ như bài toán helium và trion, việc áp dụng phép biến đổi này trở nên rất phức tạp. Hơn nữa, việc sử dụng phép biến đổi Levi-Civita sẽ chuyển không gian từ (x, y) sang (u, v) sẽ không thân thiện trong việc khảo sát sự thay đổi hàm sóng, bán kính đối với các nhóm chỉ chuyên nghiên cứu thực nghiệm vốn thực hiện trong không gian thực Oxy .

Mặc dù, bài toán xác định phổ năng lượng exciton trung hòa đã được giải quyết trong các công trình trước đây nhưng chúng tôi hi vọng có một phương pháp khác giải quyết được những khó khăn trên và phát triển phương pháp FK một cách hiệu quả các bài toán exciton trung hòa trong vùng từ trường cao và siêu cao, đồng thời phát triển cho bài toán trion. Trong nghiên cứu này, chúng tôi áp dụng phương pháp FK kết hợp với biến đổi Fourier để mô tả exciton trung hòa hai chiều trong từ trường đều. Từ các kết quả đạt được, chúng tôi đánh giá hiệu quả của phương pháp đối với bài toán một electron trong các miền từ trường khác nhau, đặc biệt là ở vùng từ trường mạnh và siêu mạnh, đồng thời xem xét khả năng mở rộng cho các hệ nhiều electron. Công trình này đánh dấu một bước tiến quan trọng trong việc hoàn thiện phương pháp FK cho các bài toán nguyên tử hai chiều trong từ trường. Hơn nữa, phép biến đổi Fourier thực hiện hoàn toàn trong không gian Oxy , rất thân thiện cho những thiết kế trong phòng thí nghiệm, giúp người làm thực nghiệm dễ dàng khảo sát tính chất từ phổ năng lượng của exciton trung hòa và xa hơn là của trion.

Bài báo này ngoài phần giới thiệu có ba phần bao gồm: Phương pháp toán tử FK, Kết quả và thảo luận và Kết luận.

2. Phương pháp toán tử FK

2.1. Phương trình Schrödinger cho exciton trong từ trường

Xét một exciton trung hòa hai chiều chuyển động trong đơn lớp TMDs nằm trên mặt phẳng Oxy , với thế năng tương tác giữa electron và lỗ trống là thế Keldysh đã được trình bày trong (Chernikov et al., 2014; Stier et al., 2018), ở đây chúng tôi viết lại trong hệ không thứ nguyên

$$V_K(r, r_0, \kappa) = -\frac{\pi}{2r_0} \left[H_0\left(\frac{\kappa r}{r_0}\right) - Y_0\left(\frac{\kappa r}{r_0}\right) \right]. \quad (1)$$

Trong đó, các thông số của thế là: độ dài chắn r_0 , hằng số điện môi trung bình κ của đơn lớp TMD. $H_0\left(\frac{\kappa r}{r_0}\right)$ và $Y_0\left(\frac{\kappa r}{r_0}\right)$ là các hàm Struve và Bessel bậc không. Các công trình gần đây đã chứng minh đơn lớp TMDs là các vật liệu hai chiều thật sự và độ dài chắn không còn liên quan đến bề dày lớp bán dẫn mà liên quan với độ phân cực hai chiều χ_{2D} qua công thức $r_0 = 2\pi\chi_{2D}$, xem chi tiết trong (Ly et al., 2023a; Stier et al., 2018).

Bây giờ, chúng tôi viết phương trình Schrödinger không thứ nguyên cho exciton trung hòa đặt trong từ trường đều như sau

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + \frac{1-\rho}{1+\rho}\frac{\gamma}{2}\hat{L} + \frac{1}{8}\gamma^2 r^2 + V_K(r, r_0, \kappa) \right] \psi(x, y) = E\psi(x, y). \quad (2)$$

Ở đây, $\rho = m_e^*/m_h^*$ là tỉ số khối lượng hiệu dụng giữa electron và lỗ trống; γ là từ trường. Chúng tôi sử dụng các kí hiệu toán tử Laplacian, moment động lượng

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \quad \hat{L} = -I\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad (3)$$

và khoảng cách tương đối giữa electron và lỗ trống là

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}. \quad (4)$$

Trong (3), chúng tôi dùng biến số phức $I^2 = -1$ để tránh nhầm lẫn với chỉ số chạy i là số nguyên. Đồng thời, hệ không thứ nguyên được sử dụng ở trên có đơn vị chiều dài là bán kính Borh hiệu dụng $a_0^* = a_0 / \rho_{\text{ex}}$, đơn vị của năng lượng là $E_h^* = \rho_{\text{ex}} E_h$, của từ trường $B_0^* = \rho_{\text{ex}}^2 B_0$ với $\rho_{\text{ex}} = \mu / m_e$, $\mu = m_h^* \cdot m_e^* / (m_h^* + m_e^*)$, là khối lượng rút gọn của exciton. Ở đây, $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2 / (m_e e^2) \approx 0.529 \text{ \AA}$ là bán kính Bohr, $E_h = m_e e^4 / 16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \approx 27.2 \text{ eV}$ là hartree, $B_0 = m_e E_h / \hbar e \approx 2.35 \times 10^5 \text{ Tesla}$ là mật độ từ thông, $m_e \approx 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ là khối lượng electron, \hbar hằng số Planck rút gọn và ϵ_0 là độ điện thẩm chân không.

2.2. Phép biến đổi Fourier

Thế Keldysh được dùng mô tả tương tác giữa electron và lỗ trống trong phương trình Schrödinger (2) thường được viết dưới dạng tích phân Laplace ngược

$$V_K(r, r_0, \kappa) = -\int_0^{+\infty} \frac{dq}{\sqrt{\kappa^2 + r_0^2 q^2}} e^{-qr}. \quad (5)$$

Một ưu điểm của việc biểu diễn dạng (5) là yếu tố ma trận của thế Keldysh có thể được tìm bằng biểu thức giải tích, một trong những yếu tố dẫn đến nghiệm số hội tụ với độ chính xác cao (Ly et al., 2023a). Tuy nhiên, khi phát triển lên bài toán hai electron, phép biến đổi này bị khó khăn khi tính yếu tố ma trận của tương tác $V_{e-e}(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$. Do đó, chúng tôi sử dụng phép biến đổi Fourier cho thế Keldysh trong (1). Đây là phép biến đổi triển vọng cho giải quyết vấn đề khó khăn này. Phép biến đổi Fourier được viết như sau:

$$V_{\kappa}(r, r_0, \kappa) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq_x dq_y}{q(\kappa + r_0 q)} \exp(Iq_x x + Iq_y y), \quad (6)$$

với q_x, q_y là các tọa độ trong không gian phức và $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$. Mặc dù, phép biến đổi này cũng được áp dụng trong công trình (Nguyen et al., 2019), nhưng trong công trình này chúng tôi đã áp dụng trực tiếp trong không gian (x, y) rất thân thiện với những thiết kế thực nghiệm, thay vì phải chuyển đổi sang không gian (u, v) . Hơn nữa, việc chuyển đổi không gian làm cho yếu tố ma trận giải tích quá phức tạp, dẫn đến chiếm nhiều tài nguyên máy tính khi giải nghiệm số. Chúng tôi hi vọng cách tiếp cận qua phép biến đổi (6) sẽ giúp chúng tôi giải quyết triệt để bài toán exciton trong từ trường đều.

2.3. Biểu diễn Hamiltonian qua dạng toán tử sinh, hủy

Để áp dụng phương pháp toán tử FK, trước hết chúng tôi biểu diễn Hamiltonian trong phương trình Schrödinger (2) theo các toán tử sinh, hủy

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha} - I\hat{\beta}), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha}^+ + I\hat{\beta}^+), \\ \hat{b} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha} + I\hat{\beta}), \quad \hat{b}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha}^+ - I\hat{\beta}^+). \end{aligned} \quad (7)$$

Trong đó, các toán tử $\hat{\alpha}, \hat{\alpha}^+, \hat{\beta}, \hat{\beta}^+$ cũng là các toán tử sinh, hủy được định nghĩa:

$$\begin{aligned} \hat{\alpha} &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad \hat{\alpha}^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial x} \right), \\ \hat{\beta} &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(y + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{\beta}^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(y - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (8)$$

với ω là tham số tự do, ảnh hưởng tốc độ hội tụ của nghiệm số. Đây là tham số quan trọng giúp cho phương pháp toán tử FK đạt tốc độ hội tụ nhanh và có độ chính xác cao, được chứng thực qua các công trình trước đây (Ly et al., 2023a; Ly et al., 2023b; Nguyen et al., 2019). Các toán tử $\hat{\alpha}, \hat{\alpha}^+, \hat{\beta}, \hat{\beta}^+$ trong (8) thỏa các hệ thức giao hoán

$$[\hat{\alpha}, \hat{\alpha}^+] = [\hat{\beta}, \hat{\beta}^+] = 1, \quad (9)$$

dẫn đến các toán tử sinh, hủy trong (7) cũng thỏa hệ thức giao hoán

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = [\hat{b}, \hat{b}^+] = 1. \quad (10)$$

Hệ thức giao hoán này rất hữu ích khi tính các yếu tố ma trận ở bước sau.

Cách đặt các toán tử sinh, hủy như trong (7) giúp cho moment động lượng (3) trở thành toán tử được chéo hóa

$$\hat{L} = \frac{1}{2}(\hat{a}^+ \hat{a} - \hat{b}^+ \hat{b}). \quad (11)$$

Để đạt được mục tiêu này, chúng tôi khai thác tính bảo toàn moment động lượng vốn có của hệ exciton khi được đặt trong từ trường

$$\hat{L}|\psi\rangle = m|\psi\rangle, \tag{12}$$

m là số lượng tử từ.

Bây giờ, chúng tôi tiếp tục biểu diễn các toán tử

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \omega(\hat{a}\hat{b} + \hat{a}^+\hat{b}^+ - \hat{a}^+\hat{a} - \hat{b}^+\hat{b} - 1), \\ x &= \frac{1}{2\sqrt{\omega}}(\hat{a}^+ + \hat{a} + \hat{b}^+ + \hat{b}), \\ y &= \frac{I}{2\sqrt{\omega}}(-\hat{a}^+ + \hat{a} + \hat{b}^+ - \hat{b}), \\ r^2 &= \frac{1}{\omega}(\hat{a}\hat{b} + \hat{a}^+\hat{b}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b} + 1). \end{aligned} \tag{13}$$

Từ (13), chúng tôi viết lại nhóm toán tử của hàm e-mũ của thế Keldysh (6) thành

$$\begin{aligned} \exp[I(q_x x + q_y y)] &= \exp[\eta(\hat{A} + \hat{A}^+ + \hat{B} + \hat{B}^+)] \\ &= \exp[\eta(\hat{A} + \hat{A}^+)] \exp[\eta(\hat{B} + \hat{B}^+)]. \end{aligned} \tag{14}$$

Ở đây, $\eta = \frac{Iq}{2\sqrt{\omega}}$, các toán tử mới $\hat{A}, \hat{A}^+, \hat{B}, \hat{B}^+$ được đặt theo các toán tử $\hat{a}, \hat{a}^+, \hat{b}, \hat{b}^+$ và

$e^{\pm I\varphi} = q_x \pm Iq_y$ như sau:

$$\hat{A} = e^{I\varphi}\hat{a}, \hat{A}^+ = e^{-I\varphi}\hat{a}^+, \hat{B} = e^{-I\varphi}\hat{b}, \hat{B}^+ = e^{I\varphi}\hat{b}^+. \tag{15}$$

Theo cách đặt ở (15), toán tử mới cũng là toán tử sinh, hủy bởi vì giao hoán tử của chúng luôn thỏa

$$[\hat{A}, \hat{A}^+] = 1, [\hat{B}, \hat{B}^+] = 1. \tag{16}$$

Tận dụng các giao hoán này sẽ làm giảm đi phần lớn khối lượng tính toán trong lúc chuyển toán tử dạng e-mũ về dạng chuẩn. Các bước chuẩn hóa này đã được trình bày trong sách chuyên khảo (Feranchuk et al., 2015, pp. 232-233) và chúng tôi viết kết quả thành

$$\begin{aligned} &\exp[\eta(\hat{A} + \hat{A}^+)] \exp[\eta(\hat{B} + \hat{B}^+)] \\ &= \exp(\eta^2) \exp(\eta\hat{B}^+) \exp(\eta\hat{A}^+) \exp(\eta\hat{B}) \exp(\eta\hat{A}). \end{aligned} \tag{17}$$

Từ đây, thế Keldysh (6) được biểu diễn qua các toán tử sinh, hủy

$$\begin{aligned} \hat{V}_\kappa(r, r_0, \kappa) &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq_x dq_y}{q(\kappa + r_0 q)} \\ &\quad \times \exp(\eta^2) \exp(\eta\hat{A}^+) \exp(\eta\hat{A}) \exp(\eta\hat{B}^+) \exp(\eta\hat{B}). \end{aligned} \tag{18}$$

Sau cùng, chúng tôi viết lại phương trình (2)

$$\left(-\frac{\omega}{2} \hat{T} + \frac{1-\rho}{1+\rho} \frac{m\gamma}{2} + \frac{\gamma^2}{8\omega} \hat{K} + \hat{V}_\kappa \right) |\psi\rangle = E|\psi\rangle. \tag{19}$$

Trong đó

$$\hat{T} = (\hat{a}\hat{b} + \hat{a}^+\hat{b}^+ - \hat{a}^+\hat{a} - \hat{b}^+\hat{b} - 1), \hat{K} = (\hat{a}\hat{b} + \hat{a}^+\hat{b}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b} + 1). \quad (20)$$

2.3. Bộ hàm cơ sở

Khi từ trường rất lớn, số hạng $\frac{1}{8}\gamma^2 r^2$ trong (2) chiếm ưu thế hơn so với thế \hat{V}_K nên các mức năng lượng sẽ tiến về các mức Landau. Trong trường hợp này, bộ hàm cơ sở tốt nhất sử dụng cho việc giải phương trình (2) là bộ hàm dao động tử điều hòa

$$|n_1, n_2(\omega)\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!}} (\hat{a}^+)^{n_1} (\hat{b}^+)^{n_2} |0(\omega)\rangle. \quad (21)$$

Trong trường hợp từ trường nhỏ và trung bình, chúng tôi vẫn có thể sử dụng bộ hàm cơ sở (21) để khai triển hàm sóng ở dạng tổ hợp tuyến tính

$$|\psi(\omega)\rangle = \sum_{j_1, j_2}^N C_{j_1, j_2} |j_1, j_2(\omega)\rangle. \quad (22)$$

Hơn nữa, trong bộ hàm cơ sở có tham số tự do ω được tích hợp vào. Điều này giúp cho hàm sóng linh hoạt hơn với mọi giá trị của từ trường ngoài (Feranchuk et al., 2015). Việc thay đổi tham số tự do ω sao cho nó rơi vào vùng tối ưu sẽ làm cho chuỗi khai triển trong hàm sóng được giới hạn đến số hạng thứ N thay vì là chuỗi vô hạn. Ngoài ra, chúng tôi khai thác tính bảo toàn moment động lượng (12) để thiết lập mối liên hệ cần thiết

$$n_1 - n_2 = 2m, \quad n_1 + n_2 = 2n. \quad (23)$$

Lúc này, bộ hàm cơ sở (21) được viết lại theo số lượng tử chính n và lượng tử từ m

$$|n, m(\omega)\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n+m)!(n-m)!}} (\hat{a}^+)^{n+m} (\hat{b}^+)^{n-m} |0(\omega)\rangle. \quad (24)$$

Từ đây, hàm sóng (22) chỉ còn một biến chạy

$$|\psi(\omega)\rangle = \sum_j^N C_j |j, m(\omega)\rangle. \quad (25)$$

Việc sử dụng bộ hàm cơ sở (24) rất thuận tiện để áp dụng các tính toán dựa trên tương tác của toán tử sinh, hủy lên hàm cơ sở. vốn rất quen thuộc và đơn giản hơn nhiều so với tính giải tích các tích phân của yếu tố ma trận.

2.4. Phương trình trị riêng - vector riêng

Bây giờ, chúng tôi chuyển phương trình đạo hàm riêng (2) về phương trình trị riêng vector riêng bằng cách thay hàm sóng (25) vào phương trình này, cuối cùng thu được phương trình

$$\mathbf{H} \mathbf{C} = E \mathbf{C}, \quad (26)$$

trong đó, \mathbf{H} là ma trận Hamiltonian, \mathbf{C} là vector riêng chứa các hệ số khai triển của hàm sóng (25), $\{C_j, j = 0 \rightarrow N\}$ và E là trị riêng, cũng là các mức năng lượng của exciton. Giải phương trình (26) sẽ thu được phổ năng lượng và hàm sóng tương ứng; các kết quả thu được sẽ được trình bày chi tiết trong phần Kết quả và thảo luận.

2.5. Các yếu tố ma trận

Trong phần này, chúng tôi tính yếu tố ma trận của các nhóm toán tử trong Hamiltonian (19) bằng cách sử dụng các công thức của toán tử sinh $\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ và toán hủy $\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$. Kết quả thu được cho yếu tố ma trận của toán tử \hat{T}, \hat{K} là

$$\begin{aligned} T_{n_1, n_2}^{k_1, k_2} &= \langle k_1, k_2 | (\hat{a}\hat{b} + \hat{a}^+\hat{b}^+ - \hat{a}^+\hat{a} - \hat{b}^+\hat{b} - 1) | n_1, n_2 \rangle \\ &= \sqrt{n_1 n_2} \delta_{n_1-1, n_2-1}^{k_1, k_2} + \sqrt{(n_1+1)(n_2+1)} \delta_{n_1+1, n_2+1}^{k_1, k_2} - (n_1 + n_2 + 1) \delta_{n_1, n_2}^{k_1, k_2}, \\ K_{n_1, n_2}^{k_1, k_2} &= \langle k_1, k_2 | (\hat{a}\hat{b} + \hat{a}^+\hat{b}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b} + 1) | n_1, n_2 \rangle \\ &= \sqrt{n_1 n_2} \delta_{n_1-1, n_2-1}^{k_1, k_2} + \sqrt{(n_1+1)(n_2+1)} \delta_{n_1+1, n_2+1}^{k_1, k_2} + (n_1 + n_2 + 1) \delta_{n_1, n_2}^{k_1, k_2}. \end{aligned} \tag{27}$$

Đối với yếu tố ma trận của toán tử thế năng Keldysh (18) có dạng hàm e-mũ nên chúng tôi tiến hành khai triển hàm e-mũ dưới dạng chuỗi Taylor

$$\begin{aligned} &\exp(\eta \hat{A}^+) \exp(\eta \hat{A}) \exp(\eta \hat{B}^+) \exp(\eta \hat{B}) \\ &= \sum_{i, j, k, l} \frac{(\eta \hat{A}^+)^i \exp(\eta \hat{A})^j (\eta \hat{B}^+)^k (\eta \hat{B})^l}{i! j! k! l!}. \end{aligned} \tag{28}$$

Sử dụng các tương tác đại số của các toán tử $\hat{A}, \hat{A}^+, \hat{B}, \hat{B}^+$ (15) lên bộ hàm cơ sở (21) và lưu ý đến điều kiện

$$\hat{A}|0\rangle = 0, \hat{B}|0\rangle = 0, \tag{29}$$

chúng tôi thu được yếu tố ma trận của toán tử thế năng Keldysh như sau

$$(V_K)_{k_2, n_2}^{k_1, n_1} = \delta_{k_1-k_2, n_1-n_2} \frac{1}{\mathcal{K}} \sum_{i_1=0}^{n_1} A_{n_1 k_1 i_1} \sum_{i_2=0}^{n_2} A_{n_2 k_2 i_2} J_p \left(\frac{r_0}{\mathcal{K}}, \omega \right). \tag{30}$$

Trong đó

$$A_{nki} = \sqrt{\frac{n!}{(n-i)!}} \sqrt{\frac{k!}{(n-i)!}} \frac{1}{i!(k-n+i)!}, \tag{31}$$

$$J_p(\alpha, \omega) = -\left(\frac{-1}{4\omega}\right)^p \int_0^\infty \exp\left(\frac{-q^2}{4\omega}\right) \frac{q^{2p}}{(1+\alpha q)} dq,$$

với $p = i_1 + i_2 + k_1 - n_1 \geq 0$. Trong trường hợp bài toán exciton trung hòa trong từ trường, tính bảo toàn (12) được xét đến nên $\delta_{k_1-k_2, n_1-n_2} = 1$. Tích phân $J_p(\alpha, \omega)$ có biểu thức truy hồi là

$$4\omega\alpha^2 J_{p+1}(\alpha, \omega) + J_p(\alpha, \omega) = (-1)^p \left[2\alpha\omega\Gamma(p+1) - \sqrt{\omega}\Gamma\left(p + \frac{1}{2}\right) \right], \tag{32}$$

rất thuận lợi cho việc tính yếu tố ma trận (30), với tích phân được viết ở dạng

$$J_0(\alpha, \omega) = -2\sqrt{\omega} \int_0^\infty \frac{\exp(-x^2)}{1 + \alpha\sqrt{\omega}x} dx. \tag{33}$$

3. Kết quả và thảo luận

3.1. Năng lượng giải tích bậc 0 của exciton trong từ trường

Năng lượng giải tích bậc 0 của exciton trong từ trường được xác định bằng cách lấy trực tiếp các giá trị trên đường chéo chính của ma trận Hamiltonian (26), kết quả thu được

$$E_{n,m}^{(0)}(\omega) = \frac{\omega}{2}(2n+1) + \frac{1-\rho}{1+\rho} \frac{m\gamma}{2} + \frac{\gamma^2}{8\omega}(2n+1) + \frac{1}{\kappa} \sum_{i_1=0}^{n+m} \frac{(n+m)!}{(n+m-i_1)!i_1!} \sum_{i_2=0}^{n-m} \frac{(n-m)!}{(n-m-i_2)!i_2!} J_{i_1+i_2} \left(\frac{r_0}{\kappa}, \omega \right). \quad (34)$$

Nếu xét các trạng thái ns ($m=0$), biểu thức năng lượng (34) được viết lại thành

$$E_{ns}^{(0)}(\omega) = \frac{\omega}{2}(2n+1) + \frac{\gamma^2}{8\omega}(2n+1) + \frac{n!n!}{\kappa} \sum_{i_1=0}^n \frac{1}{(n-i_1)!i_1!} \sum_{i_2=0}^n \frac{1}{(n-i_2)!i_2!} J_{i_1+i_2} \left(\frac{r_0}{\kappa}, \omega \right). \quad (35)$$

Bởi vì, năng lượng không phụ thuộc vào tham số tự do ω nên

$$\frac{\partial E_{ns}^{(0)}(\omega)}{\partial \omega} = 0. \quad (36)$$

Giải phương trình (36), ta biết được giá trị $\omega^{(0)}$ tương ứng với năng lượng $E_{ns}^{(0)}$. Chúng tôi kiểm chứng sự phù hợp của biểu thức năng lượng (35) với kết quả trong công trình (Stier et al., 2018) trường hợp WSe₂, tương ứng với các thông số cấu trúc vật liệu như: $\rho_{ex} = 0.2$, $\kappa = 4.5$, $r_0 = 4.5$ nm, $E_g = 1.890$ eV. Ở đây, đơn vị chuyển đổi chiều dài là 0.1 a.u. = 2.646 nm, của năng lượng là 1 a.u. = 5.442 eV và của từ trường là 0.001 a.u. = 9.402 Tesla. Kết quả được ghi tại Bảng 1 cho thấy, độ lệch năng lượng mức 1s là 0.5% đến 0.6%, hai mức 2s và 3s là 0.3% đến 0.4%.

Bảng 1. Năng lượng bậc 0 thay đổi theo từ trường tính từ biểu thức năng (35), xét cho đơn lớp WSe₂

Từ trường B (Tesla)	Mức 1s (meV)		Mức 2s (meV)		Mức 3s (meV)	
	FK-OM	Tài liệu (Stier et al., 2018)	FK-OM	Tài liệu (Stier et al., 2018)	FK-OM	Tài liệu (Stier et al., 2018)
0	1738	1728	1843	1853	1866	1873
20	1738	1728	1845	1854	1875	1882
40	1738	1729	1851	1859	1892	1898
60	1739	1729	1859	1865	1912	1917

Khi từ trường càng cao và ở các mức kích thích cao hơn độ lệch này có xu hướng giảm, ví dụ độ lệch mức 1s trường hợp không có từ trường là 0,6%, trong khi độ lệch mức 3s trường hợp từ trường 60 Tesla chỉ còn 0.3%. Điều này có thể giải thích được: khi từ trường càng lớn các mức năng lượng sẽ tiến gần các mức Landau, và các mức năng lượng kích thích cao sẽ tiến nhanh đến các mức Landau trước mức cơ bản. Hơn nữa, bộ hàm chúng tôi sử dụng

là bộ hàm dao động từ điều hòa nên nó sẽ tiếp cận tốt nhất khi các mức năng lượng là các mức Landau. Trong công trình (Ly et al., 2023b) cũng chỉ ra rằng, để đạt được các mức Landau thì từ trường phải hơn 600 Tesla, gấp 10 lần cường độ trong phòng thí nghiệm hiện nay. Đây chính là lí do dẫn đến sai lệch giữa năng lượng tính từ biểu thức (35) so với công trình (Stier et al., 2018). Do đó, đối với trường hợp cần độ chính xác cao hơn, chúng tôi cần giải số phương trình trị riêng vector riêng (26) để thu được kết quả chính xác hơn.

3.2. Năng lượng chính xác bằng số của exciton trong từ trường

Trong công trình này, chúng tôi giải số phương trình trị riêng vector riêng để có được nghiệm với độ chính xác cho trước. Thực nghiệm hiện nay có thể phân tích phổ năng lượng đến 0,1 meV (Goryca et al., 2019). Do đó, chúng tôi chọn độ chính xác cho trước của năng lượng là 10^{-6} , độ chính xác này tương ứng với 0.01 meV nhỏ hơn 10 lần phép phân tích thực nghiệm hiện nay.

Để đạt được năng lượng chính xác đến 10^{-6} , chuỗi hàm sóng (25) phải có bậc $N = 30$. Về nguyên tắc, khi bậc $N \rightarrow \infty$ thì nghiệm số sẽ tiến đến giá trị chính xác. Tuy nhiên, trong phương pháp của chúng tôi, tham số tự ω được tích hợp trong hàm sóng sẽ giúp cho nghiệm số hội tụ nhanh hơn. Các công trình áp dụng FK-OM trước đây cũng chỉ ra rằng đối với những bài toán khác nhau, cần xác định vùng tham số tối ưu (Ly et al., 2023a; Nguyen et al., 2019). Trong công trình này, chúng tôi cũng khảo sát toàn miền của ω và chọn được vùng tối ưu là $\omega_{1s} = 0.09 \rightarrow 0.16$ đối với mức $1s$, $\omega_{2s} = 0.015 \rightarrow 0.05$ đối với mức $2s$ và $\omega_{3s} = 0.005 \rightarrow 0.04$ đối với mức $3s$. Kết quả tính toán được thể hiện trong Bảng 2.

Bảng 2. Năng lượng thay đổi theo từ trường từ phương trình trị riêng vector riêng (26), xét cho đơn lớp WSe₂

Từ trường B (Tesla)	Mức $1s$ (meV)		Mức $2s$ (meV)		Mức $3s$ (meV)	
	FK-OM	Tài liệu (Stier et al., 2018)	FK-OM	Tài liệu (Stier et al., 2018)	FK-OM	Tài liệu (Stier et al., 2018)
0	1727.56	1728	1851.63	1853	1872.92	1873
20	1727.68	1728	1853.65	1854	1881.28	1882
40	1728.05	1729	1858.92	1859	1897.68	1898
60	1728.66	1729	1866.33	1865	1917.19	1917

Số liệu Bảng 2 cho thấy, năng lượng thu được bằng FK-OM hoàn toàn phù hợp với kết quả từ công trình (Stier et al., 2018) với độ lệch trung bình 0.03%. Kết quả này thu được từ chương trình tính được lập trình trên ngôn ngữ FORTRAN kết hợp với việc sử dụng gói LAPACK. Trong đó, chúng tôi đã viết lại từ biến số thực Real*8 sang biến số thực Real*16 giúp tính các vòng lặp trong tích phân (33) và các số hạng trong dấu tổng của yếu tố ma trận (30) với độ chính xác 16 chữ số thập phân. Trong chương trình này, lần đầu chúng tôi áp dụng lập trình song song MPI (Message Passing Interface) để tính các yếu tố ma trận và giải số phương trình trị riêng vector riêng. Việc này giúp rút thời gian để khảo vùng hội tụ ω .

4. Kết luận

Trong nghiên cứu này, chúng tôi giới thiệu một phương pháp hiệu quả để giải phương trình Schrödinger cho bài toán exciton trong từ trường đều, kết hợp giữa phương pháp toán tử cổ điển và biến đổi Fourier trực tiếp trong không gian (x, y) rất thân thiện với những thiết kế thực nghiệm. Hơn nữa, phương pháp này rất có triển vọng cho bài toán nguyên tử hai electron như bài toán trion trong đơn lớp TMDs.

Từ phương pháp này, chúng tôi đã thu được năng lượng giải tích bậc 0 theo từ trường đều có cường độ bất kỳ với độ lệch dưới 0.6% so với công trình khác. Đồng thời, năng lượng bằng số cũng được tính với độ chính xác 10^{-6} , kết quả phù hợp với công trình khác với độ lệch trung bình 0.03% khi hàm sóng được ngắt chuỗi đến 30 số hạng khai triển.

Chương trình tính bằng ngôn ngữ FORTRAN được viết với việc lần đầu áp dụng lập trình song song MPI cho việc tính các yếu tố ma trận và giải phương trình trị riêng vector riêng. Điều này giúp cải thiện thời gian tính toán cho bài toán nguyên tử một electron và xa hơn nữa, đó là một khởi đầu để chúng tôi giải quyết các bài toán trion.

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

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Hernandez-Rueda, J., Noordam, M. L., Komen, I., & Kuipers, L. (2021). Nonlinear optical response of a WS₂ monolayer at room temperature upon multicolor laser excitation. *ACS Photonics*, 8(2), 550–556. <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.0c01567>
- 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. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.205420>
- Liu, E., van Baren, J., Lu, Z., Taniguchi, T., Watanabe, K., Smirnov, D., Chang, Y.-C., & Lui, C. H. (2021). Exciton-polaron Rydberg states in monolayer MoSe₂ and WSe₂. *Nature Communications*, 12(1), 6131. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-26304-w>
- Ly, D.-N., Le, D.-N., Nguyen, D.-A. P., Hoang, N.-T. D., Phan, N.-H., Nguyen, H.-M. L., & Le, V.-H. (2023a). Retrieval of material properties of monolayer transition metal dichalcogenides from magnetoexciton energy spectra. *Physical Review B*, 107(20), 205304. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.205304>
- Ly, D.-N., Le, D.-N., Phan, N., & Le, V. (2023b). Thermal effect on magnetoexciton energy spectra in monolayer transition metal dichalcogenides. *Physical Review B*, 107(15), 155410. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.155410>
- Molas, M. R., Slobodeniuk, A. O., Nogajewski, K., Bartos, M., Bala, Ł., Babiński, A., Watanabe, K., Taniguchi, T., Faugeras, C., & Potemski, M. (2019). Energy spectrum of two-dimensional excitons in a nonuniform dielectric medium. *Physical Review Letters*, 123(13), 136801. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.136801>

- 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, 152–164. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2019.05.007>
- 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. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.057405>

NEUTRAL EXCITONS IN TRANSITION METAL DICHALCOGENIDE MONOLAYERS UNDER A HOMOGENEOUS MAGNETIC FIELD: AN OPERATOR-BASED APPROACH

Le Huu Duc, Tran Vinh Phat, Ly Duy Nhat*

Ho Chi Minh City University of Education, Vietnam

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

Received: August 30, 2024; Revised: October 23, 2024; Accepted: August 05, 2025

ABSTRACT

This study proposes an effective method to solve the Schrödinger equation for the neutral exciton problem in a homogeneous magnetic field by combining the traditional FK (Feranchuk-Komarov) operator method with the direct Fourier transform in space (x, y) . The proposed framework is well suited to experimental designs and provides a foundation for extending the analysis to two-electron atomic systems, such as the trion problem in monolayer transition metal dichalcogenides (TMDs). We obtained zero-order analytic energy in a homogeneous magnetic field of any intensity, achieving a deviation of less than 0.6% compared to other studies. Additionally, we calculated the numerical energy with an accuracy of 10^{-6} , and the results are consistent with other works, showing an average deviation of 0.03% when the wave function is expanded to 30 terms. Furthermore, we developed a calculation program in FORTRAN, utilizing MPI (Message Passing Interface) parallel programming to calculate matrix elements and solve eigenvalue equations. This advancement improves computational times for the one-electron atom problem and paves the way for solving more complex problems, such as the trion problem.

Keywords: annihilation and creation operators; basic set; exciton; Fourier transformation; operator method; trion; two-dimensional atomic system