

Bài báo nghiên cứu

NĂNG LƯỢNG EXCITON TRONG ĐƠN LỚP TITANIUM TRISULFIDE
TỪ LÝ THUYẾT NHIỀU LOẠN BẬC HAI

Nguyễn Quốc Khánh, Trương Thanh Hải, Lê Hoàng Việt, Lê Đỗ Đăng Khoa*

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: 21-4-2026; Ngày nhận bài sửa: 08-5-2026; Ngày duyệt đăng: 11-8-2026

TÓM TẮT

Các công trình trước đây đã thành công trong việc tính năng lượng exciton cho một số loại vật liệu bán dẫn dị hướng bằng phương pháp số. Trong công trình này, chúng tôi tiếp cận bài toán bằng phương pháp giải tích với lý thuyết nhiễu loạn cho một loại vật liệu bán dẫn dị hướng là đơn lớp titanium trisulfide (TiS_3). Do lý thuyết nhiễu loạn truyền thống không cho kết quả chính xác với bài toán dị hướng, chúng tôi đã sử dụng lý thuyết nhiễu loạn có điều tiết. Bước đầu tiên là chuẩn hóa thang đo không gian nhằm chuyển phần dị hướng trong thành phần động năng Hamiltonian vào thành phần thế Rytova-Keldysh, sau đó áp dụng phép biến đổi Levi-Civita để đưa phương trình Schrödinger về dạng dao động tử phi điều hòa và biểu diễn nó dưới dạng đại số bằng các toán tử sinh-hủy lượng tử. Từ đó, chúng tôi tính toán được các yếu tố ma trận dưới dạng giải tích. Sử dụng lý thuyết nhiễu loạn có điều tiết, chúng tôi xây dựng biểu thức bổ chính năng lượng đến bậc hai. Kiểm tra bằng tính số cho thấy độ chính xác của lý thuyết nhiễu loạn bậc hai rất cao với sai số phần lớn dưới 1.0 meV so với các số liệu chính xác cao từ phương pháp số. Điều này có ý nghĩa quan trọng, gợi ý cho việc sử dụng lý thuyết nhiễu loạn bậc hai để xây dựng biểu thức giải tích cho năng lượng exciton trong đơn lớp bán dẫn dị hướng trong các công trình tiếp theo.

Từ khóa: tính toán đại số; toán tử sinh-hủy tương tự; vật liệu bán dẫn dị hướng; đơn lớp titanium trisulfide; lý thuyết nhiễu loạn có điều tiết

1. Giới thiệu

Sự phát triển của vật liệu hai chiều (2D) đã mở ra nhiều tiềm năng trong lĩnh vực điện tử và công nghệ nano (Arora, 2021). Trong số đó, các bán dẫn thuộc họ kim loại chuyển tiếp hai chalcogen (Transition Metal Dichalcogenides – TMDCs) đã thu hút sự quan tâm đáng kể nhờ các tính chất quang điện tử đặc biệt (Berkelbach et al., 2013; Chernikov et al., 2014). Một trong những đặc trưng quan trọng của các hệ này là phổ năng lượng bị chi phối mạnh bởi các giả hạt exciton với năng lượng liên kết lớn do hiệu ứng giam giữ.

Cite this article as: Nguyen, Q. K., Truong, T. H., Le, H. V., & Le, D. D. K. (2026). Exciton energies in titanium trisulfide monolayers: A second-order perturbation theory approach. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 23(8), 1786-1796. [https://doi.org/10.54607/hcmue.js.23.8.5741\(2026\)](https://doi.org/10.54607/hcmue.js.23.8.5741(2026))

Bên cạnh TMDCs, nghiên cứu các vật liệu dị hướng như phosphorene và các hợp chất trisulfide (TiS_3 , ZrS_3 ...) cũng cho thấy phổ năng lượng bị ảnh hưởng mạnh bởi exciton (Alidoust et al., 2020; Kezerashvili et al., 2022). Do cấu trúc tinh thể đặc thù, các hệ này thể hiện tính dị hướng rõ rệt trong hấp thụ quang học và khối lượng hiệu dụng của hạt tải. Điều này đặt ra yêu cầu nghiên cứu lại cấu trúc và phổ năng lượng exciton trong các lớp vật liệu trên.

Nhiều phương pháp số đã được sử dụng để khảo sát bài toán (Prada et al., 2015; Wu, 2022), tuy nhiên chúng thường tập trung vào tính toán năng lượng hoặc khó cung cấp cái nhìn giải tích về sự phụ thuộc vào tham số vật liệu. Lí thuyết nhiễu loạn là một hướng tiếp cận tiềm năng, đã có nhiều nhóm vận dụng để giải quyết những bài toán đẳng hướng (Ly et al., 2022; MacDonald & Ritchie, 1986; Nguyen et al., 2019). Bên cạnh đó, có những công trình áp dụng lí thuyết này cho các hệ bất đẳng hướng (Kezerashvili et al., 2022), cũng như xây dựng thành công biểu thức năng lượng theo tham số vật liệu đối với các hệ đẳng hướng (Dinh et al., 2025). Tuy nhiên, hạn chế của lí thuyết nhiễu loạn truyền thống là tốc độ hội tụ thấp và khó đạt độ chính xác cao.

Trong công trình này, chúng tôi phát triển một nền tảng tính toán cho phép sử dụng phương pháp lí thuyết nhiễu loạn có điều tiết thông qua tham số tự do ω nhằm cải thiện sự hội tụ. Bằng cách chuẩn hóa không gian và áp dụng biến đổi Levi-Civita, bài toán được đưa về dạng dao động tử phi điều hòa, cho phép sử dụng biểu diễn toán tử để tính toán hiệu quả. Tính toán cụ thể được tiến hành cho hệ bán dẫn dị hướng titanium trisulfide (TiS_3) và cho phép xây dựng các biểu thức giải tích mô tả phổ năng lượng exciton với độ chính xác cao.

2. Lí thuyết nhiễu loạn có điều tiết

2.1. Phương trình Schrödinger cho exciton trong đơn lớp dị hướng

Đầu tiên, xét hệ exciton trung hòa trong đơn lớp dị hướng bao gồm một electron và một lỗ trống tương tác với nhau, ta được Hamiltonian của hệ như sau:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_{ex}^2}{2m_{ex}} + \frac{\hat{P}_{ey}^2}{2m_{ey}} + \frac{\hat{P}_{hx}^2}{2m_{hx}} + \frac{\hat{P}_{hy}^2}{2m_{hy}} + \hat{V}_{e-h}, \quad (1)$$

trong đó $\hat{P}_{ex}, \hat{P}_{ey}, \hat{P}_{hx}, \hat{P}_{hy}, m_{ex}, m_{ey}, m_{hx}, m_{hy}, \hat{V}_{e-h}$ lần lượt là toán tử động lượng, khối lượng của electron, lỗ trống trên hai phương x, y và thế tương tác giữa electron và lỗ trống.

Xét đơn lớp dị hướng, thế Coulomb không đủ tốt để mô tả tương tác giữa electron và lỗ trống nên chúng tôi sử dụng thế tương tác giữa chúng là thế Rytova-Keldysh (Keldysh, 1979)

$$V_K(r) = -\frac{e^2}{8\epsilon_0 r_0} \left[H_0\left(\frac{\kappa r}{r_0}\right) - Y_0\left(\frac{\kappa r}{r_0}\right) \right], \quad (2)$$

với κ là hằng số điện môi trung bình, r_0 là độ dài chắn có liên quan tới độ phân cực 2D của vật liệu đơn lớp (Cudazzo et al., 2011), ϵ_0 là hằng số điện môi chân không, e là điện tích nguyên tố, H_0 và Y_0 lần lượt là hàm Struve và Bessel bậc không.

Tiếp tục, ta đưa Hamiltonian về hệ quy chiếu khối tâm bằng cách xác lập các tọa độ khối tâm và tọa độ chuyển động tương đối:

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= \frac{m_{ex}\mathbf{x}_e + m_{hx}\mathbf{x}_h}{M_x}, \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_e - \mathbf{x}_h, \quad M_x = m_{ex} + m_{hx}, \\ \mathbf{Y} &= \frac{m_{ey}\mathbf{y}_e + m_{hy}\mathbf{y}_h}{M_y}, \quad \mathbf{y} = \mathbf{y}_e - \mathbf{y}_h, \quad M_y = m_{ey} + m_{hy}. \end{aligned} \quad (3)$$

Trong đó $\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{x}, \mathbf{y}$ các vector chuyển động khối tâm và chuyển động tương đối của hệ. Sau quá trình biến đổi giải tích thông thường, ta tách được Hamiltonian làm hai thành phần – khối tâm và tương đối. Với chuyển động khối tâm có thể được giải tách biến một cách trực tiếp, với nghiệm dạng sóng phẳng tương tự bài toán hạt tự do. Còn thành phần tương đối, ta được:

$$\hat{H}_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\mu_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{\mu_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \hat{V}_K, \quad (4)$$

với $\mu_x = \frac{m_{ex}m_{hx}}{m_{ex} + m_{hx}}, \mu_y = \frac{m_{ey}m_{hy}}{m_{ey} + m_{hy}}$ lần lượt là khối lượng hiệu dụng rút gọn của exciton theo trục x, y .

Để thuận tiện cho việc tính toán, ta đưa Hamiltonian tương đối về dạng không thứ

nguyên bằng cách đặt $a_0^* = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu_x e^2}, Ry^* = \frac{\mu_x e^4}{16\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}$ lần lượt là đơn vị độ dài và đơn vị năng

lượng. Vậy Hamiltonian tương đối dạng không thứ nguyên sẽ như sau:

$$\hat{H}_{\text{rel}} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\mu_x}{\mu_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \hat{V}_K. \quad (5)$$

Tới đây, Hamiltonian xuất hiện tham số dị hướng μ_x / μ_y trong thành phần động năng. Qua nhiều công trình (Le et al., 2024; Prada et al., 2015; Wu, 2022), chúng tôi nhận thấy rằng việc chuyển tính dị hướng vào thế tương tác thì việc giải phương trình sẽ trở nên dễ dàng hơn. Không làm mất tính tổng quát, chúng tôi thực hiện phép chuẩn hóa thang không

gian $x \rightarrow x, y \rightarrow \sqrt{\frac{\mu_y}{\mu_x}} y$ (Le et al., 2024). Khi đó, toán tử Hamilton trở thành:

$$\hat{H}_{\text{rel}} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \hat{V}_K. \quad (6)$$

Như vậy, bài toán được đưa về dạng trong đó thành phần động năng đẳng hướng và thế Rytova-Keldysh hiệu dụng dị hướng (Le et al., 2024). Tiếp tục, để thuận tiện cho việc tính toán, chúng tôi sử dụng thế Rytova-Keldysh dưới dạng Fourier (Nguyen et al., 2019) sau khi thực hiện phép chuẩn hóa thang không gian. Thế Rytova-Keldysh dị hướng thu được như sau:

$$\hat{V}_K(x, y) = -\frac{1}{2\pi\kappa} \sqrt{\frac{\mu_y}{\mu_x}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \frac{\exp(it_1 x + it_2 y)}{\tau(1 + \alpha\tau)}, \quad (7)$$

$$\text{với } \tau = \sqrt{t_1^2 + \frac{\mu_y}{\mu_x} t_2^2}, \alpha = r_0 / \kappa a_0^*.$$

Như đã đề cập ở trên, để tính năng lượng exciton trong công trình này, chúng tôi áp dụng lý thuyết nhiễu loạn có điều kiện cho phương trình Schrödinger. Và để thuận tiện hơn trong việc tính toán bằng phương pháp đại số, chúng tôi sử dụng phép biến đổi Levi-Civita (Levi-Civita, 1956) để đưa về dạng dao động từ phi điều hòa hai chiều:

$$x = u^2 - v^2, \quad y = uv. \quad (8)$$

Từ đó, chúng tôi thu được phương trình Schrödinger có dạng

$$\left[-\frac{1}{8} \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right) + V_K(u, v) \right] \psi = E(u^2 + v^2) \psi, \quad (9)$$

trong đó thế Rytova-Keldysh khi chuyển sang không gian u, v có dạng

$$\begin{aligned} V_K(u, v) &= (u^2 + v^2) V'_K \\ &= -\frac{1}{2\pi\kappa} \sqrt{\frac{\mu_y}{\mu_x}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \frac{\exp[it_1(u^2 - v^2) + 2it_2 uv]}{\tau(1 + \alpha\tau)} (u^2 + v^2). \end{aligned} \quad (10)$$

2.2. Biểu diễn đại số thông qua các toán tử sinh-hủy

Bây giờ chúng tôi sử dụng tính toán đại số thông qua các toán tử sinh hủy như trình bày trong chuyên khảo (Feranchuk et al., 2015) cho phương trình

$$\hat{H}\psi(u, v) = E\hat{R}\psi(u, v), \quad (11)$$

với $\hat{R} = u^2 + v^2$. Trong bài này chúng tôi nghiên cứu đơn lớp dị hướng tương tự TMDC và tham khảo cách đặt toán tử sinh hủy trong công trình (Nguyen et al., 2019) như sau

$$\begin{aligned} u^2 + v^2 &= \frac{1}{\omega} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{b}^\dagger \hat{b} + 1 + \hat{a}\hat{b} + \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger), \\ uv &= \frac{1}{4i\omega} (\hat{a}^2 - \hat{b}^2 - \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{b}^{\dagger 2} - 2\hat{a}^\dagger \hat{b} + 2\hat{a}\hat{b}^\dagger), \\ \hat{T} &= \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} = \omega (\hat{a}\hat{b} + \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{b}^\dagger \hat{b} - 1), \\ u^2 - v^2 &= \frac{1}{2\omega} (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{b}^{\dagger 2} + \hat{b}^2 + 2\hat{a}^\dagger \hat{b} + 2\hat{a}\hat{b}^\dagger), \end{aligned} \quad (12)$$

trong đó $\hat{a}, \hat{a}^\dagger, \hat{b}, \hat{b}^\dagger$ là các toán tử sinh hủy thỏa hệ thức giao hoán: $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$ là cơ sở cho các tính toán đại số.

Vấn đề then chốt mà tính toán cần giải quyết là xử lý toán tử dạng mũ trong thể Rytova-Keldysh dạng $\hat{O} = \exp \left[it_1 (u^2 - v^2) + 2it_2 uv \right]$. Trong biểu diễn đại số, ta có thể viết lại toán tử $\hat{O}$ như sau:

$$\hat{O} = \exp \left\{ \frac{it_1}{2\omega} (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{b}^{\dagger 2} + \hat{b}^2 + 2\hat{a}^{\dagger} \hat{b}^{\dagger} + 2\hat{a} \hat{b}) + \frac{t_2}{2\omega} (-\hat{a}^2 + \hat{b}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{b}^{\dagger 2} + 2\hat{a}^{\dagger} \hat{b} - 2\hat{a} \hat{b}^{\dagger}) \right\}. \quad (13)$$

Khi khai triển các toán tử mũ, biểu thức thu được chứa các tổng vô hạn làm cho quá trình tính toán trở nên đặc biệt phức tạp. Để giải quyết vấn đề này, chúng tôi tái cấu trúc toán tử $\hat{O}$ dưới dạng tích của các toán tử cơ sở, mỗi toán tử trong số đó đều có yếu tố ma trận xác định được một cách tường minh. Quá trình này không tầm thường và được trình bày riêng trong mục tiếp theo.

2.3. Tính toán thành phần thể Rytova-Keldysh

Việc áp dụng biến đổi không gian trong bài nghiên cứu này giúp chúng ta dễ dàng khử thành phần dị hướng trong toán tử động năng. Nhưng điều đó làm cho thành phần thể Rytova-Keldysh trở nên dị hướng và phức tạp hơn trong tính toán. Xét

$$V_K = -\frac{1}{2\pi\kappa} \sqrt{\frac{\mu_y}{\mu_x}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \frac{\hat{O}}{\tau(1+\alpha\tau)} (u^2 + v^2). \quad (14)$$

ta cần phải xử lý hai vấn đề, thứ nhất là tái cấu trúc phần toán tử $\hat{O}$, thứ hai là tính tích phân số phát sinh trong các biểu thức yếu tố ma trận. Các tích phân phát sinh có chung dạng cho các vấn đề exciton trong đơn lớp bán dẫn dị hướng và đã được khảo sát kỹ trong công trình (Le et al., 2026a). Ở đây ta sẽ bàn về toán tử $\hat{O}$ như dưới đây.

Với toán tử $\hat{O}$, nó là toán tử mũ của một tổng các toán tử con trong đó. Với tính toán thông thường ta có thể sử dụng công thức Baker–Campbell–Hausdorff

$$e^X e^Y = e^{X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]+\frac{1}{12}[X,[X,Y]]-\frac{1}{12}[Y,[X,Y]]+\dots} \quad (15)$$

Bằng trực quan ta có thể thấy, nếu không tái cấu trúc lại, ta cần tính một lượng lớn các tổng, thậm chí là vô hạn. Chính vì vậy, ta cần tìm một bộ toán tử có giao hoán vòng quanh (đại số kín) để tổng có thể ngắt tại một vị trí nào đó. Và bộ toán tử $\{\hat{A}, \hat{A}^{\dagger}, \hat{M}, \hat{M}^{\dagger}, \hat{N}, i\hat{K}\}$ trong công trình (Nguyen et al., 2019) làm được điều đó

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \frac{it_1 - t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}} \hat{a}^2 + \frac{it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}} \hat{b}^2, & \hat{A}^{\dagger} &= \frac{-it_1 - t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}} \hat{a}^{\dagger 2} + \frac{-it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}} \hat{b}^{\dagger 2}, \\ \hat{K} &= \frac{-t_1 - it_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}} (\hat{a} \hat{b}^{\dagger}) - \frac{t_1 - it_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}} (\hat{a}^{\dagger} \hat{b}), \\ \hat{M}^{\dagger} &= \hat{a}^{\dagger} \hat{b}^{\dagger}, \hat{N} = \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + \hat{b}^{\dagger} \hat{b} + 1, \hat{M} = \hat{a} \hat{b}. \end{aligned} \quad (16)$$

Sử dụng quy trình đưa ra trong (Feranchuk et al., 2015) và áp dụng thành công trong (Nguyen et al., 2019), ta viết lại toán tử $\hat{O}$ thành dạng

$$\hat{O} = e^{t(\hat{A}-2i\hat{K}-\hat{A}^\dagger)} = e^{\alpha(t)\hat{A}^\dagger} e^{\theta(t)\hat{M}^\dagger} e^{\varepsilon(t)i\hat{K}} e^{\omega(t)\hat{N}} e^{u(t)\hat{M}} e^{v(t)\hat{A}}, \quad (17)$$

với $t = \frac{1}{2\omega} \sqrt{t_1^2 + t_2^2}$. Tương tự như trong công trình (Nguyen et al., 2019) dạng mũ chứa các toán tử $i\hat{K}$, $\hat{N}$ có thể tách thêm qua các toán tử

$$\begin{aligned} \hat{m}^\dagger &= \frac{-t_2 + it_1}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}} \hat{a}^\dagger \hat{b}, \quad \hat{m} = \frac{-t_2 - it_1}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}} \hat{b}^\dagger \hat{a}, \\ \hat{n} &= \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{b}^\dagger \hat{b}. \end{aligned} \quad (18)$$

Sau quá trình tính toán, chúng tôi thu được

$$\begin{aligned} \hat{O} &= \exp\left(-\frac{t}{4t^2+1} \hat{A}^\dagger\right) \exp\left(-\frac{4t^2}{4t^2+1} \hat{M}^\dagger\right) \exp(2t\hat{m}^\dagger) \\ &\exp\left(\frac{1}{2}(\hat{n} - \hat{N}) \ln(4t^2+1)\right) \exp(-2t\hat{m}) \exp\left(-\frac{4t^2}{4t^2+1} \hat{M}\right) \exp\left(\frac{t}{4t^2+1} \hat{A}\right). \end{aligned} \quad (19)$$

Đây là dạng chuẩn của toán tử khi các toán tử hủy ở bên phải và dạng sinh ở bên trái. Bây giờ các tính toán yếu tố ma trận trở nên dễ dàng hơn qua các biến đổi đại số. Chi tiết về kỹ thuật tính toán có thể tham khảo trong (Feranchuk et al., 2015).

2.4. *Áp dụng lý thuyết nhiễu loạn có điều tiết*

Chúng tôi sử dụng phương pháp lý thuyết nhiễu loạn có điều tiết để giải số cho phương trình (10). Trước tiên chúng tôi tách Hamiltonian thành hai thành phần:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \beta \hat{V}, \quad \hat{R} = \hat{R}_0 + \beta \hat{S}. \quad (20)$$

Trong đó, thành phần $\hat{H}_0$ và $\hat{R}_0$ chỉ chứa những toán tử trung hòa, thành phần $\hat{V}$ và $\hat{S}$ xem là phần nhiễu loạn. Hệ số β là hệ số nhiễu loạn. Để tiếp tục, chúng tôi khai triển năng lượng và hàm sóng theo dạng chuỗi như sau:

$$\begin{aligned} E &= E_{nm} + \sum_{s=1}^{\infty} \beta^{(s)} \Delta E_{n,m}^{(s)}, \quad \psi = \psi_{n,m}^{(0)} + \sum_{s=1}^{\infty} \beta^{(s)} \Delta \psi_{n,m}^{(s)}, \\ \Delta \psi_{n,m}^{(j)} &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\mu=-k}^k c_{k\mu}^{(j)} \psi_{k\mu}, \end{aligned} \quad (21)$$

với $(n, m) \neq (k, \mu)$.

Trong công trình này, chúng tôi đã xây dựng bổ chính hàm sóng và bổ chính năng lượng cho bậc hai và thu được kết quả

$$\Delta E^{(2)} = \frac{1}{R_{nmnm}} \left[\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\mu=-k}^k (V_{nmk\mu} - E_{nm} S_{nmk\mu}) \cdot \frac{E_{nm} S_{k\mu nm} - V_{k\mu nm}}{R_{k\mu k\mu} (E_{k\mu} - E_{nm})} \right]. \quad (22)$$

Các yếu tố ma trận $R_{nmnm}, R_{k\mu k\mu}, S_{k\mu nm}, S_{nmk\mu}$ trong các biểu thức trên được tính có kết quả như sau:

$$R_{k\mu k\mu} = \frac{2k+1}{\omega}, R_{nmnm} = \frac{2n+1}{\omega},$$

$$S_{nmk\mu} = \frac{1}{\omega} \left[\sqrt{k^2 - \mu^2} \delta_{n-m, k-\mu-1} \delta_{n+m, k+\mu-1} + \sqrt{(k+1)^2 - \mu^2} \delta_{n-m, k-\mu+1} \delta_{n+m, k+\mu+1} \right],$$

$$S_{k\mu nm} = \frac{1}{\omega} \left[\sqrt{n^2 - m^2} \delta_{k-\mu, n-m-1} \delta_{k+\mu, n+m-1} + \sqrt{(n+1)^2 - m^2} \delta_{k\mu, n-m+1} \delta_{k\mu, n+m+1} \right].$$

Và thành phần có chứa thể Rytova-Keldysh, ta tính toán dựa trên yếu tố ma trận sau:

$$O_{n'm'nm} = \langle n+s, m' | \hat{O} | n, m \rangle =$$

$$\sum_{q=0}^{\lfloor \frac{n-m}{2} \rfloor} \sum_{p=0}^{\lfloor \frac{n+m}{2} \rfloor} \sum_{q_1=0}^{\lfloor \frac{n+s-m'}{2} \rfloor} \sum_{p_1=0}^{\lfloor \frac{n+s+m'}{2} \rfloor} \sum_{h=q_1+p_1-q-p-s}^{\min(n+m'-p_1+q_1-q-p, n+m-2p)} \sum_{l=m'-m+p-p_1-q+q_1}^{n-m-2q-h} \frac{1}{q! p! h! l! p_1! q_1!}$$

$$\times \frac{2^{m-m'+2s-3q_1+3q-p_1+p+4h+2l} (-1)^{m-m'+s-2q_1+2q+h+l} t^{2(s-q_1+p+q+2h)}}{(1+4t^2)^{n+2m+2q-2p+2l+\frac{1}{2}q_1+p_1+m'}}$$

$$\times \frac{(n+m-2p-h+l)! \sqrt{(n-m)! (n+m)! (n+s+m')! (n+s-m')!}}{(n-m-2q-h-l)! (n-m-2p-h)! (n+m'-p_1+q_1-q-p-h)!}$$

$$\times \frac{1}{(s-q_1-p_1+p+q+h)! (m-m'-p+p_1+q-q_1+l)!}.$$

3. Kết quả và thảo luận

Áp dụng các công thức (22) của lý thuyết nhiễu loạn với các biểu thức tường minh của các yếu tố ma trận, chúng tôi lập trình Python cho năng lượng exciton.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi tập trung khai thác ưu thế của lý thuyết nhiễu loạn có điều tiết thông qua việc sử dụng tham số tự do ω . Từ đó xác định giá trị tối ưu của ω và tạo tiền đề cho các nghiên cứu trong tương lai. Trên lý thuyết tham số ω bậc s chính là nghiệm

của phương trình $\frac{\partial E^{(s-1)}}{\partial \omega} = 0$. Tuy vậy, việc sử dụng tham số ω như trên có tốc độ hội tụ

thay đổi không đáng kể mà lại làm phức tạp hóa bài toán. Vì vậy, chúng tôi sử dụng ω là nghiệm của phương trình:

$$\frac{\partial E^{(0)}}{\partial \omega} = 0, \quad (23)$$

với

$$E^{(0)} = \frac{H_{nmnm}^0}{R_{nmnm}^0} = \frac{\omega^2}{8} + \frac{\omega}{2n+1} V_{nmnm}^K,$$

và V_{nmnm}^K là thành phần tính toán dựa trên yếu tố ma trận của thể Rytova-Keldysh.

Qua đó, tính toán cho các kết quả năng lượng exciton tiến nhanh về giá trị chính xác thu được từ giải số sử dụng chương trình trong công trình (Le et al., 2026c). Duy nhất có trạng thái 2s, hàm sóng bị nhiễu động rất lớn, cho thấy giá trị ω ở gần miền phân kì của thành phần nào đó trong biểu thức bổ chính bậc hai. Để vượt qua điểm này, ta cần hiệu chỉnh tham số tự do 1% giá trị.

Chúng tôi áp dụng cho TiS_3 với các thông số: $r_0 = 4,434\text{nm}$; $\mu_x = 0,251$; $\kappa = 4,5$; $\beta = 1,135$. Các thông số vật liệu này được lấy từ công trình (Van der Donck & Peeters, 2018). Kết quả tính toán phổ năng lượng cho các trạng thái 1s đến 5s được tổng hợp trong bảng dưới đây:

Trạng thái	1s	2s	3s	4s	5s
Giá trị ω tối ưu	0,317	0,206	0,146	0,111	0,09
$E^{(0)}$	-182,9	-48,00	-21,23	-11,82	-7,508
$E^{(2)}$	-186,4	-44,25	-20,05	-11,31	-7,202
Chính xác	-187,2	-46,67	-20,65	-11,55	-7,358

Qua bảng dữ liệu, ta có thể thấy giá trị năng lượng thu được ở bậc bổ chính thứ hai đã tiệm cận rất sát với giá trị chính xác của bài toán. Đặc biệt, ngay cả ở gần đúng bậc không, kết quả cũng đã khá tốt.

Khi đối chiếu với các giá trị giải số trong công trình Le et al. (2026b), ứng với bộ thông số vật liệu ($r_0 = 4,434\text{ nm}$; $\mu_x = 0,251$; $\kappa = 4,9$; $\beta = 1,135$), kết quả cho thấy sự phù hợp tốt. Cụ thể, năng lượng 1s 2s 3s lần lượt là -172,534 -51,964 -22,882.

Trong trường hợp $E^{(1)}$, khi áp dụng lí thuyết nhiễu loạn có điều tiết, kết quả tính toán cho thấy bổ chính năng lượng bậc nhất ($\Delta E^{(1)}$) bằng không. Kết quả này cũng phù hợp với tính chất của phương pháp, do phần nhiễu loạn đã được xây dựng sao cho phần năng lượng bổ chính bậc nhất triệt tiêu (phần nhiễu loạn không chứa các toán tử trung hòa nên

$\Delta E^{(1)} = \frac{V_{nmnm}}{R_{nmnm}} = 0$). Đối với các bổ chính bậc cao hơn, việc tính toán được tiếp tục thực hiện

bằng chương trình số, chúng tôi đã tiến hành tính toán đến bậc bổ chính thứ 20. Kết quả thu được cho thấy chuỗi bổ chính hội tụ rất tốt, giá trị năng lượng sau khi cộng các bổ chính gần như trùng khớp với giá trị chính xác.

Tuy nhiên, khi xét đến các bậc bổ chính cao như trên thì khối lượng tính toán tăng lên đáng kể. Nguyên nhân là số lượng yếu tố ma trận, tổng theo các trạng thái trung gian và các phép tính truy hồi cần thực hiện đều tăng nhanh theo bậc nhiễu loạn. Vì vậy, thời gian tính toán ở các bậc cao có thể kéo dài đến vài ngày. Trong phạm vi mục tiêu hiện tại của công trình, kết quả đến bậc bổ chính thứ 2 đã đủ để đánh giá độ hội tụ và độ chính xác của phương pháp, nên việc mở rộng tính toán đến các bậc cao hơn chưa thật sự cần thiết. Hiện nay, chúng tôi vẫn đang tiếp tục cải tiến chương trình, tối ưu hóa thuật toán và cách lưu trữ dữ liệu trung

gian nhằm rút ngắn thời gian tính toán. Những cải tiến này sẽ được cập nhật và trình bày trong các công bố tiếp theo.

4. Kết luận

Trong công trình này chúng tôi đã thiết lập thành công quy trình tính toán phổ năng lượng exciton cho đơn lớp bán dẫn dị hướng thông qua tiếp cận đại số kết hợp với lý thuyết nhiễu loạn có điều tiết, trình bày được biểu thức bổ chính năng lượng bậc hai. Thông qua việc khảo sát chi tiết cho đơn lớp titanium trisulfide (TiS_3), chúng tôi đã xác định được các giá trị tối ưu của tham số điều tiết ω cho các trạng thái từ 1s đến 5s để thu được giá trị năng lượng tiệm cận với giá trị chính xác. Điều này khẳng định tính tin cậy và hiệu quả của lý thuyết nhiễu loạn có điều tiết đến bậc hai trong việc khảo sát các hệ vật liệu 2D có tính dị hướng cao. Kết quả cho thấy lý thuyết nhiễu loạn bậc hai cho năng lượng exciton chính xác đến dưới 1,0 meV đối với các trạng thái 1s, 3s, 4s, 5s và dưới 2,5 meV đối với trạng thái 2s. Điều này quan trọng trong định hướng cho việc xây dựng biểu thức giải tích cho năng lượng exciton trong vật liệu bán dẫn 2D dị hướng.

- ❖ **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 Nguồn ngân sách khoa học và công nghệ Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh trong đề tài sinh viên NCKH năm học 2025-2026. Nhóm nghiên cứu gửi lời cảm ơn chân thành đến GS.TSKH. Lê Văn Hoàng đã đặt bài toán và hướng dẫn để thực hiện đề tài này.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Alidoust, M., Halterman, K., Pan, D., Willatzen, M., & Akola, J. (2020). Strain-engineered widely tunable perfect absorption angle in black phosphorus from first principles. *Physical Review B*, 102(11), 115307. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.115307>
- Arora, A. (2021). Magneto-optics of layered two-dimensional semiconductors and heterostructures: Progress and prospects. *Journal of Applied Physics*, 129(12), 120902. <https://doi.org/10.1063/5.0042683>
- Berkelbach, T. C., Hybertsen, M. S., & Reichman, D. R. (2013). Theory of neutral and charged excitons in monolayer transition metal dichalcogenides. *Physical Review B*, 88(4), 045318. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.045318>
- Chernikov, A., Berkelbach, T. C., Hill, H. M., Rigosi, A., Li, Y., Aslan, O. B., Reichman, D. R., Hybertsen, M. S., & Heinz, T. F. (2014). Exciton binding energy and nonhydrogenic Rydberg series in monolayer WS_2 . *Physical Review Letters*, 113(7), 076802. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.076802>
- Cudazzo, P., Tokatly, I. V., & Rubio, A. (2011). Dielectric screening in two-dimensional insulators: Implications for excitonic and impurity states in graphene. *Physical Review B*, 84(8), 085406. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.085406>

- Dinh, H. T., Phan, N. H., Ly, D. N., Le, D. N., Nguyen, N. Q., & Le, V. H. (2025). Analytical expression for exciton energies in monolayer transition metal dichalcogenides. *Physical Review B*, 111(3), 035443. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.111.035443>
- Feranchuk, I., Ivanov, A., Le, V. H., & Ulyanekov, A. (2015). *Non-perturbative description of quantum systems*. Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-13006-4>
- Keldysh, L. V. (1979). Coulomb interaction in thin semiconductor and semimetal films. *JETP Letters*, 29, 658–661.
- Kezerashvili, R. Y., Haywood, M. R., & Boykin, D. L. (2022). Magnetoexcitons in phosphorene monolayers, bilayers, and heterostructures. *Physical Review Research*, 4(1), 013154. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.013154>
- Le, D. D. K., Le, V. H., & Hoang, D. N. T. (2026a). Double integral regularization and calculation for the problem of anisotropic two-dimensional exciton. *Communications in Physics*, 36(3). <https://doi.org/10.15625/0868-3166/23911>
- Le, D. D. K., Le, V. H., Le, D. N., Nguyen, P. D. A., Nguyen, T. S., Hoang, D. N.T., & Le, V. H. (2026b). *Anisotropic two-dimensional magnetoexciton with exact center-of-mass separation*. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2603.02051>
- Le, D. D. K., Le, H. V., Le, D. N., Nguyen, P. D. A., Nguyen, T. S., Hoang, D. N. T., & Le, V. H. (2026c). Highly accurate magnetoexciton energies and wave functions in anisotropic two-dimensional semiconducting materials [Manuscript submitted for publication].
- Le, D. D. K., Le, H. V., Le, Q. H., & Le, V. H. (2024). Anisotropic exciton in two-dimensional black phosphorus in a uniform magnetic field: An algebraic approach. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 21(7), 1229–1240. [https://doi.org/10.54607/hcmue.js.21.7.4210\(2024\)](https://doi.org/10.54607/hcmue.js.21.7.4210(2024))
- Levi-Civita, T. (1956). *Opere matematiche: Memorie e note* (Vol. 2). Nicola Zanichelli Editore.
- 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 of Education Journal of Science*, 19(3), 399–410. [https://doi.org/10.54607/hcmue.js.19.3.3363\(2022\)](https://doi.org/10.54607/hcmue.js.19.3.3363(2022))
- MacDonald, A. H., & Ritchie, D. S. (1986). Hydrogenic energy levels in two dimensions at arbitrary magnetic fields. *Physical Review B*, 33(12), 8336–8344. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.8336>
- Nguyen, P. A., Ly, D. N., Le, D. N., Hoang, D. 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: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 113, 152–164. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2019.05.007>
- Prada, E., Álvarez, J. V., Narasimha-Acharya, K. L., Bailén, F. J., & Palacios, J. J. (2015). Effective-mass theory for the anisotropic exciton in two-dimensional crystals: Application to phosphorene. *Physical Review B*, 91(24), 245421. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.245421>

- Van der Donck, M., & Peeters, F. M. (2018). Excitonic complexes in anisotropic atomically thin two-dimensional materials: Black phosphorus and TiS_3 . *Physical Review B*, 98(23), 235401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.235401>
- Wu, S. (2022). Anisotropic exciton states and excitonic absorption spectra in a freestanding monolayer black phosphorus. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 141, 115238. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2022.115238>

EXCITON ENERGIES IN TITANIUM TRISULFIDE MONOLAYERS: A SECOND-ORDER PERTURBATION THEORY APPROACH

Nguyen Quoc Khanh, Truong Thanh Hai, Le Hoang Viet, Le Do Dang Khoa*

Ho Chi Minh City University of Education, Vietnam

*Corresponding author: Le Do Dang Khoa – Email: khoale0412@gmail.com

Received: April 21, 2026; Revised: May 8, 2026; Accepted: August 11, 2026

ABSTRACT

Numerical methods have been widely used to calculate exciton energies in anisotropic semiconductors. This study develops an analytical framework based on perturbation theory for monolayer titanium trisulfide (TiS_3). Because conventional perturbation theory does not accurately describe anisotropic systems, we use a regularized perturbation approach. First, a spatial scaling transformation maps the kinetic anisotropy of the Hamiltonian onto the Rytova-Keldysh potential. A Levi-Civita transformation then converts the Schrödinger equation into an anharmonic oscillator representation, which is formulated algebraically using quantum creation and annihilation operators. This framework allows the matrix elements to be derived analytically. We then construct analytical expressions for energy corrections up to second order. Numerical tests show that most deviations of the second-order results from high-accuracy numerical data are below 1.0 meV. These findings support the use of second-order perturbation theory to derive analytical expressions for exciton energies in anisotropic semiconductor monolayers.

Keywords: algebraic formulation; analogous creation and annihilation operators; anisotropic semiconductors; monolayer titanium trisulfide; regularized perturbation theory