

Bài báo nghiên cứu

ẢNH HƯỞNG CỦA NHIỆT ĐỘ LÊN MỨC NĂNG LƯỢNG THẤP
CỦA EXCITON TRONG TỪ TRƯỜNG ĐỀULý Duy Nhất^{1*}, Huỳnh Nguyễn Thanh Trúc², Phan Ngọc Hưng¹¹Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam²Trường THPT Marie Curie, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam*Tác giả liên hệ: Lý Duy Nhất – Email: nhatld@hcmue.edu.vn

Ngày nhận bài: 30-5-2022; ngày nhận bài sửa: 30-9-2022; ngày duyệt đăng: 11-10-2022

TÓM TẮT

Hiệu ứng nhiệt độ lên phổ năng lượng exciton trung hòa trong đơn lớp WSe₂ trong từ trường đều theo cơ chế mới lần đầu tiên được nghiên cứu trong công trình này. Cơ chế này dựa hoàn toàn khác với cơ chế exciton-phonon đã được nghiên cứu bởi nhiều công trình trước đây trong trường hợp không có từ trường. Nhờ tách chuyển động khối tâm cho exciton trung hòa và thu được Hamiltonian chính xác, chúng tôi nhận thấy có thành phần liên quan với nhiệt độ và từ trường mà trong các nghiên cứu trước đây đã bỏ qua. Chúng tôi đã giải chính xác bằng số phương trình Schrodinger bằng phương pháp toán tử Feranchuk-Komarov cho các trạng thái 1s, 2s, và 3s và khảo sát ảnh hưởng của nhiệt độ lên phổ năng lượng. Kết quả cho thấy với từ trường lên đến 100 Tesla năng lượng của exciton trạng thái 3s tại 300K có thể khác biệt gần 6% so với tại nhiệt độ 0K. Chúng tôi cũng tính bán kính exciton và thấy rằng nó thay đổi theo nhiệt độ, ví dụ với từ trường 100 Tesla, bán kính tại nhiệt độ 300K tăng lên hơn 50% so với tại nhiệt độ 0K. Kết quả này gợi ý cho chúng tôi nghiên cứu sâu hơn hiệu ứng nhiệt độ lên các tính chất vật lý của exciton trong đơn lớp TMD.

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

1. Giới thiệu

Exciton là một giả hạt tồn tại trong chất bán dẫn dưới tương tác điện giữa electron và lỗ trống. Thông thường thể tương tác này là tương tác Coulomb nhưng nếu electron bị giam giữ trong đơn lớp bán dẫn thì tương tác này là tương tác Coulomb mạnh (Cudazzo, Tokatly, & Rubio, 2011), được mô tả bằng thế Keldysh (Keldysh, 1979). Gần đây, exciton trung hòa trong đơn lớp TMD (Transition metal dichalcogenide monolayer) là một chủ đề nghiên cứu rất được quan tâm (Chernikov et al., 2014; Nguyen, Ly, Le, Hoang, & Le, 2019; Stier et al., 2018). Chernikov (2014), lần đầu tiên gợi ý phương pháp trích xuất những thông tin cấu trúc TMD như khối lượng hiệu dụng rút gọn, độ dài chắn và hằng số điện môi trung bình bằng

Cite this article as: Ly Duy Nhat, Huynh Nguyen Thanh Truc, & Phan Ngoc Hung (2022). Temperature effect on low energy level of neutral exciton in a uniform magnetic field. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 19(11), 1768-1778.

cách so sánh phổ năng lượng lí thuyết và thực nghiệm. Kết quả của công trình này thu được phổ năng lượng lí thuyết trùng với thực nghiệm với năng lượng liên kết 0.32 eV của đơn lớp WS₂. Một lần nữa khẳng định mô hình tương tác Keldysh là đúng cho đơn lớp bán dẫn này khi sử dụng khối lượng rút gọn hiệu dụng 0.16 m_0 , trong đó m_0 là khối lượng electron để truy xuất được chiều dài chắn 75 Å. Các công trình tiếp theo, ví dụ Stier (2018) hay Goryca (2019) nghiên cứu phổ năng lượng exciton trong từ trường đều để truy xuất thêm khối lượng hiệu dụng. Đối với vùng từ trường có cường độ lớn các mức năng lượng trở thành các mức Landau, năng lượng các mức exciton phụ thuộc tuyến tính vào cường độ từ trường. Làm khớp các mức năng lượng thực nghiệm ở vùng từ trường cao sẽ tìm ra khối lượng rút gọn hiệu dụng của exciton. Tuy nhiên, các phổ năng lượng thực nghiệm được đo ở nhiệt độ lớn hơn 4 K trong khi phổ lí thuyết giả sử phổ năng lượng thu được ở 0 K. Sự chênh lệch nhiệt độ này có thể ảnh hưởng đến kết quả cuối cùng.

Để giải quyết các vấn đề này, một loại các công trình nghiên cứu phổ năng lượng exciton ở nhiệt độ thấp 4 K đến nhiệt độ phòng khoảng 300 K (Arora et al., 2019, 2015). Các công trình này đã nghiên cứu sự thay đổi phổ năng lượng cộng hưởng và thời gian sống của exciton theo nhiệt độ dựa trên cơ chế tương tác exciton - phonon. Cơ chế này cho phép dự đoán thời gian sống của exciton trong đơn lớp TMD. Tuy nhiên, các công trình này chưa xét tới sự có mặt của từ trường. Nhờ công trình trước đây nghiên cứu sự chuyển động của khối tâm ảnh hưởng lên phổ năng lượng exciton trong từ trường (Hoang, Ly, & Le, 2020), một gợi ý cho chúng tôi nghiên cứu sự ảnh hưởng của nhiệt độ lên phổ năng lượng khi có sự hiện diện của từ trường. Chúng tôi thực hiện lại quy trình tách khối tâm một cách chính xác cho chuyển động electron và lỗ trống và thu được Hamiltonian, trong đó có sự xuất hiện thêm thành phần nhiệt độ. Như vậy, ngoài hiệu ứng nhiệt độ theo cơ chế tương tác exciton - phonon phổ năng lượng còn chịu thêm sự tác động từ thể tương tác do nhiệt độ chứa trong Hamiltonian chính xác. Trong thành phần thể tương tác mới này, chẳng những chứa yếu tố nhiệt độ còn có yếu tố từ trường lồng vào đó, cho nên hiệu ứng nhiệt độ gây ra sẽ được tăng cường gấp bội khi cường độ từ trường lớn. Đây là hiệu ứng quan trọng không thể bỏ qua khi nghiên cứu phổ năng lượng exciton trong từ trường đều. Công trình này là khởi đầu cho nghiên cứu hiệu ứng mới này cho ba mức năng lượng ở trạng thái $s, m = 0$.

Phương pháp toán tử FK đã có những thành công cho các bài toán nguyên tử trong từ trường đều và gần đây là các nghiên cứu cho exciton trong lớp TMD trong từ trường đều (Hoang, Nguyen, Hoang, & Le, 2016; Nguyen et al., 2019) đã chứng minh tính hiệu quả và độ tin cậy cao của phương pháp. Trên cơ sở đó, chúng tôi tiếp tục sử dụng phương pháp này như là sự kế thừa và phát triển phương pháp để giải phương trình Schrödinger có các yếu tố ma trận phức cho bài toán exciton trung hòa có từ trường đều. Trong công trình này chúng tôi sẽ trình bày tóm tắt quy trình tách chuyển động khối tâm cho exciton để thu được Hamiltonian chính xác, từ đó trình bày chi tiết sự xuất hiện của nhiệt độ và từ trường là hai yếu tố chính gây ra hiệu ứng nhiệt độ lên phổ năng lượng exciton. Sau đó chúng tôi có trình

bày kết quả và thảo luận hiệu ứng này tác động lên ba mức năng lượng $1s$, $2s$, $3s$ cho đơn lớp WSe_2 .

2. Phương pháp toán tử FK khảo sát hiệu ứng nhiệt độ trên phổ năng lượng exction

2.1. Tách chuyển động khối tâm cho exciton

Tách chuyển động khối tâm là bước quan trọng để dẫn tới việc phát hiện ra cơ chế mới gây ra hiệu ứng nhiệt độ. Việc tách chuyển động khối tâm của hệ electron – lỗ trống chính xác đã được thực hiện trong công trình gần đây (Hoang et al., 2020) và trình bày chi tiết trong Luận án tiến sĩ (Ly, 2022). Trong phần này chúng tôi nhắc lại kết quả thu được Hamiltonian chính xác có chứa thành phần nhiệt độ và từ trường. Các bước tách chuyển động khối tâm được tóm gọn như sau:

(i) Viết phương trình Schrödinger cho hệ electron – lỗ trống trong từ trường đều \vec{B} và chứng minh thành phần moment động lượng trên trục Oz của electron và của lỗ trống riêng phần không giao hoán với Hamiltonian.

(ii) Chuyển Hamiltonian trên trong hệ tọa độ khối tâm \vec{R} và chuyển động tương đối giữa electron và lỗ trống \vec{r} . Trong bước này, chúng tôi chỉ ra là không thể tách Hamiltonian một cách triệt để do toán tử động lượng \hat{P} không bảo toàn, nghĩa là toán tử động lượng không giao hoán với Hamiltonian. Để tách được chuyển động khối tâm, chúng tôi phải dùng khái niệm véc-tơ giả động lượng $\hat{P}_0 = \hat{P} - \frac{e}{2}\vec{B} \times \vec{r}$, e là điện tích nguyên tố, bởi vì đại lượng này bảo toàn.

(iii) Dùng trị riêng \vec{K} và hàm riêng của véc-tơ giả động lượng

$$\chi(\vec{R}, \vec{r}) = f(\vec{r}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\vec{K} + \frac{e}{2} \vec{B} \times \vec{r} \right) \cdot \vec{R} \right\}, \quad (1)$$

với $f(\vec{r})$ là một hàm bất kì, để thu được Hamiltonian chuyển động tương đối

$$\hat{H}_{rel} = \frac{1}{2\mu} \hat{p}^2 + \frac{e^2 B^2}{8\mu} (x^2 + y^2) + \alpha_{ex} \frac{eB}{2\mu} \hat{l}_z + V_{h-e}(r) - \frac{1}{M} (e\vec{B} \times \vec{K}) \cdot \vec{r}. \quad (1)$$

Trong đó, \hat{p} là động lượng tương đối giữa electron và lỗ trống, $\mu = m_h m_e / M$ là khối lượng rút gọn, tham số $\alpha_{ex} = (m_h - m_e) / M$, và $M = m_h + m_e$ là tổng khối lượng hiệu dụng của lỗ trống m_h và electron m_e được ước lượng trong Bảng 1 công trình (Kylänpää & Komsa, 2015). \hat{l}_z là toán tử moment động lượng có trị riêng $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Một lưu ý là toán tử \hat{l}_z không giao hoán với Hamiltonian (2) nên toán tử này không bảo toàn. Thế năng tương tác $V_{h-e}(r)$ giữa electron và lỗ trống trong đơn lớp TMD có dạng thế Keldysh (Keldysh, 1979). Thành phần $K^2 / 2M$ là động năng của khối tâm chuyển động tự do trong từ trường nên không gây ra hiệu ứng vật lí lên phổ năng lượng, do đó chúng tôi không xét phần này và đã

lượng bỏ khỏi Hamiltonian tương đối (2). Thành phần $-(e\vec{B} \times \vec{K}) \cdot \vec{r} / M$ là yếu tố gây ra hiệu ứng nhiệt độ lên phổ năng lượng exciton và chúng tôi sẽ trình bày kỹ trong phần sau.

2.2. Hiệu ứng nhiệt độ

Hiệu ứng nhiệt độ lên phổ năng lượng exciton được chúng tôi nghiên cứu dựa trên cơ chế mới khác hoàn toàn cơ chế exciton-phonon. Cơ chế này do thành phần $-(e\vec{B} \times \vec{K}) \cdot \vec{r} / M$ gây ra. Yếu tố nhiệt độ nằm ẩn bên trong động lượng của khối tâm. Nếu xem chuyển động của khối tâm là chuyển động nhiệt hai chiều có động năng $K^2 / 2M = k_B T$ thì K có liên quan đến nhiệt độ tuyệt đối T theo biểu thức

$$K = \sqrt{2Mk_B T}, \tag{2}$$

ở đây k_B là hằng số Boltzmann. Như vậy thành phần

$$V_{\text{Tem}}(x, y) = -(e\vec{B} \times \vec{K}) \cdot \vec{r} / M = \frac{eB}{M} (K_y x - K_x y) \tag{3}$$

vừa chứa cùng lúc hai yếu tố từ trường và nhiệt độ nên hiệu ứng nhiệt độ này sẽ không xảy ra khi không có từ trường ngoài. Khi từ trường và nhiệt độ đủ lớn thành phần này ảnh hưởng lên phổ năng lượng, đặc biệt với sự tách mức năng lượng. Mức độ ảnh hưởng của nhiệt độ như thế nào sẽ được phân tích trong phần sau.

Chúng tôi xem chuyển động của khối tâm có động lượng bằng nhau ở mọi hướng $K_x = K_y = K / \sqrt{2}$ và viết lại thể tương tác do nhiệt độ (4) như sau

$$V_{\text{Tem}}(x, y) = \frac{eBK}{M\sqrt{2}}(x - y). \tag{4}$$

Từ Hamiltonian (2) chúng tôi viết phương trình Schrödinger cho exciton trung hòa đặt trong từ trường trong hệ đơn vị nguyên tử có đơn vị chiều dài là bán kính Bohr hiệu dụng $a_0^* = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / \mu e^2$, đơn vị năng lượng là Hartree hiệu dụng $E_h^* = \mu e^4 / 16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2$ và đơn vị từ trường là $B_0 = \mu E_h^* / e\hbar$ như sau:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \alpha_{\text{ex}} \frac{\hat{l}_z}{2} + \frac{\gamma^2}{8} (x^2 + y^2) + V_{h-e}(r) + V_{\text{Tem}}(x, y) - E \right\} \psi(x, y) = 0, \tag{5}$$

trong đó bán kính $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, toán tử moment động lượng được định nghĩa

$$\hat{l}_z = -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \tag{6}$$

và thể tương tác do nhiệt độ

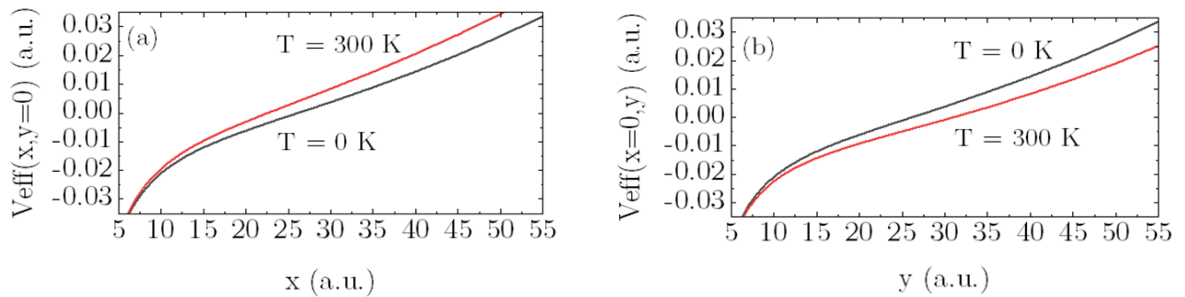
$$V_{\text{Tem}}(x, y) = \beta_{\text{ex}} \gamma \sqrt{k_0 T} (x - y), \tag{7}$$

$\beta_{\text{ex}} = \frac{\sqrt{m_h m_e}}{m_h + m_e}$, $k_0 = 3.166811563 \times 10^{-6}$ là hằng số Boltzmann có thứ nguyên K^{-1} và T là nhiệt độ tuyệt đối có thứ nguyên Kelvin. Thế năng tương tác $V_{h-e}(r)$ giữa electron và lỗ trống trong đơn lớp TMD có dạng thế Keldysh (Keldysh, 1979) phụ thuộc vào κ là hằng số điện môi trung bình, r_0 là độ dài chắn có liên quan tới độ phân cực χ_{2D} của đơn lớp TMD, $r_0 = 2\pi\chi_{2D}$, và bán kính r thông qua hàm Struve và Bessel bậc không

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

Cần chú ý khi $r \rightarrow 0$ thế Keldysh $V_K \rightarrow \ln r$, đây là tương tác Coulomb mạnh do exciton bị sự giới hạn không gian trong đơn lớp TMD. Như vậy hiệu ứng do exciton chuyển động trong đơn lớp TMD sẽ ảnh hưởng mạnh lên mức cơ bản và các mức kích thích thấp (Chernikov et al., 2014).

Trong công trình (Stier et al., 2018) nghiên cứu sự ảnh hưởng của từ trường lên cấu trúc và phổ năng lượng của exciton trong đơn lớp WSe₂ cho kết quả bán kính mức 1s, 2s, 3s là $r_{1s} = 1.7 \text{ nm}$ ($\approx 6.4 \text{ a.u.}$), $r_{2s} = 6.6 \text{ nm}$ ($\approx 25 \text{ a.u.}$), và $r_{3s} = 14.3 \text{ nm}$ ($\approx 54 \text{ a.u.}$). Chúng tôi dựa vào những ước lượng này để khảo sát sự ảnh hưởng đồng thời của từ trường và nhiệt độ lên tách mức năng lượng kích thích thứ nhất. Hình 1 là một ví dụ thể hiện hai đường thế hiệu dụng tác động lên exciton trong từ trường $\gamma = 0.01 \text{ a.u.}$ ($\approx 94 \text{ T}$) cho hai trường hợp nhiệt độ $T = 0 \text{ K}$ và $T = 300 \text{ K}$. Trong ví dụ này, khi bán kính gần bằng 7.5 a.u. thì hai đường thế hiệu dụng bắt đầu tách xa nhau, cho thấy hiệu ứng nhiệt độ sẽ gây ra đáng kể từ mức kích thích 2s, 2p trở đi.



Hình 1. Thế năng hiệu dụng: (a) $V_{\text{eff}}(x, y=0) = -1/\kappa r + (\gamma\sqrt{k_0 T}/2)x + \gamma^2 x^2/8$;

(b) $V_{\text{eff}}(x=0, y) = -1/\kappa r - (\gamma\sqrt{k_0 T}/2)y + \gamma^2 y^2/8$ tác động lên exciton trong đơn lớp WSe₂ khi xét đến hiệu ứng nhiệt độ $T = 0 \text{ K}$ và $T = 300 \text{ K}$ trong trường hợp hằng số điện môi $\kappa = 4.5$, từ trường $\gamma = 0.01 \text{ a.u.}$ ($\approx 94 \text{ T}$), bán kính $1 \text{ a.u.} = 0.2595 \text{ nm}$, năng lượng $1 \text{ a.u.} = 5.5484 \text{ eV}$.

2.3. Phương pháp toán tử FK giải số phương trình Schrödinger

Phương pháp toán tử FK (Feranchuk, Ivanov, Le, & Ulyanenkov, 2015) đã được áp dụng thành công cho bài toán nguyên tử ba chiều và exciton hai chiều có màn chắn đặt trong trường ngoài (Cao, Ly, Hoang, & Le, 2019; Ly, Hoang, & Le, 2021; Nguyen et al., 2019). Chi tiết các bước áp dụng phương pháp này đã được trình bày trong các nhiều công trình trước đây. Nhưng để tiện theo dõi chúng tôi ghi lại những điểm trọng tâm các bước áp dụng và tập trung trình bày yếu tố ma trận của thế tương tác do nhiệt độ dẫn đến phương trình trị riêng véc-tơ riêng. Phương trình này có các yếu tố ma trận dạng phức nhưng vẫn bảo đảm tính Hermitian $H_{ij} = H_{ji}^*$, do đó trị riêng thu được vẫn là số thực cũng chính là năng lượng của exciton. Để giải phương trình trị riêng véc-tơ riêng dạng phức chúng tôi không thể dùng các code chương trình tính của chúng tôi phát triển ở các công trình trước mà phải viết lại code dựa trên gói LAPACK (Netlib.org. LAPACK: Linear Algebra PACKage, n.d.). Các bước áp dụng cụ thể được trình bày dưới đây.

Trước tiên chúng tôi sử dụng phép biến đổi Levi-Civita (Levi-Civita, 1956)

$$x = u^2 - v^2, \quad y = 2uv \tag{9}$$

để chuyển phương trình Schrödinger (7) trong không gian (x, y) về dạng dao động tử phi điều hòa hai chiều trong không gian (u, v)

$$\left\{ -\frac{1}{8} \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right) + \alpha_{ex} \frac{\gamma}{2} (u^2 + v^2) \hat{L} + (u^2 + v^2) V_K(u, v) - E(u^2 + v^2) + \frac{\gamma^2}{8} (u^2 + v^2)^3 + \beta_{ex} \gamma \sqrt{k_0 T} (u^4 - v^4) \right\} \psi(u, v) = 0. \tag{10}$$

Bài toán dao động tử phi điều hòa rất thuận tiện tính toán bằng phương pháp đại số qua biểu diễn toán tử sinh hủy

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha} - i\hat{\beta}), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha} + i\hat{\beta}), \quad \hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha} + i\hat{\beta}), \quad \hat{b}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\alpha} - i\hat{\beta}), \tag{11}$$

trong đó

$$\hat{\alpha} = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(u + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial u} \right), \quad \hat{\alpha}^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(u - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial u} \right), \quad \hat{\beta} = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(v + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial v} \right), \quad \hat{\beta}^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(v - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial v} \right). \tag{12}$$

và ω được xem như một tham số tự do giúp điều chỉnh tốc độ hội tụ của bài toán. Điều này đã được thảo luận trong công trình (Nguyen et al., 2019). Các toán tử sinh, hủy phải thỏa mãn các tính chất giao hoán

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = [\hat{b}, \hat{b}^+] = 1, \quad [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^+, \hat{a}^+] = [\hat{b}, \hat{b}] = [\hat{b}^+, \hat{b}^+] = 0. \tag{13}$$

Bước thứ hai, chúng tôi sẽ chuyển các toán tử trong Hamiltonian (12) về các toán tử sinh, hủy. Như đã trình bày ở phần trên, toán tử moment động lượng chứa các toán tử trung hòa $\hat{n}_a = \hat{a}^+ \hat{a}$ và $\hat{n}_b = \hat{b}^+ \hat{b}$

$$\hat{L} = \frac{1}{2}(\hat{a}^+ \hat{a} - \hat{b}^+ \hat{b}) \tag{14}$$

nhưng không bảo toàn nên số lượng tử từ m không phải là tham số cố định mà là chỉ số chạy với điều kiện $|m| \leq n = 0, 1, 2, \dots$ là số lượng tử chính.

Bước thứ ba, chúng tôi viết phương trình Schrödinger lại ở dạng đại số như sau

$$\hat{H}|\psi\rangle = E\hat{R}|\psi\rangle, \tag{15}$$

trong đó các toán tử \hat{H} , \hat{R} được biểu diễn qua các toán tử sinh, hủy

$$\begin{aligned} \hat{R} &= \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b} + 1 + \hat{a} \hat{b} + \hat{a}^+ \hat{b}^+, \\ \hat{H} &= \frac{\omega^2}{8}(\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b} + 1 - \hat{a} \hat{b} - \hat{a}^+ \hat{b}^+) + \alpha_{\text{ex}} \frac{\gamma}{2} \hat{R} \hat{L} + \frac{\gamma^2}{8\omega^2} \hat{R}^3 - \omega \hat{V}_K + \frac{1}{2\omega} \beta_{\text{ex}} \gamma \sqrt{k_0 T} \hat{V}_T. \end{aligned} \tag{16}$$

Trong biểu thức (18), toán tử \hat{V}_K mô tả thế chắn Keldysh được viết ở dạng tích phân

$$\hat{V}_K = -\frac{1}{\kappa} \int_0^\infty \frac{dq}{\sqrt{1 + \omega^2 r_0^2 q^2 / \kappa^2}} e^{-q\hat{R}} \hat{R}, \tag{17}$$

và toán tử \hat{V}_T có dạng phức có liên quan đến thế tương tác do nhiệt độ với phần thực và ảo như sau:

$$\begin{aligned} \text{Re}(\hat{V}_T) &= (\hat{a}^+ \hat{a}^+ + \hat{b}^+ \hat{b}^+ + \hat{a} \hat{a} + \hat{b} \hat{b} + 2\hat{b}^+ \hat{a} + 2\hat{a}^+ \hat{b}) \hat{R}, \\ \text{Im}(\hat{V}_T) &= (\hat{a}^+ \hat{a}^+ - \hat{b}^+ \hat{b}^+ - \hat{a} \hat{a} + \hat{b} \hat{b} - 2\hat{b}^+ \hat{a} + 2\hat{a}^+ \hat{b}) \hat{R}. \end{aligned} \tag{18}$$

Phương trình (17) có dạng phương trình cho dao động tử phi điều hòa hai chiều vì vậy bộ hàm cơ sở dao động tử điều hòa hai chiều được sử dụng là thích hợp nhất. Do toán tử moment động lượng không bảo toàn nên m được xem là chỉ số chạy, với $|m| \leq n$. Đây là điểm khác biệt trong việc giải phương trình (17) ở công trình này so với những công trình áp dụng phương pháp FK trước đây (Nguyen et al., 2019).

Trong bước thứ tư, bộ hàm cơ sở hai chiều có hai chỉ số chạy n, m được viết lại ở dạng đại số

$$|n, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n+m)!(n-m)!}} (\hat{a}^+)^{n+m} (\hat{b}^+)^{n-m} |0(\omega)\rangle, \tag{19}$$

trong đó \hat{a} , \hat{a}^+ , \hat{b} , \hat{b}^+ là toán tử sinh, hủy. Bộ hàm cơ sở (21) là trực giao và chuẩn hóa thỏa mãn các điều kiện

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

Bước quan trọng thứ năm là tính yếu tố ma trận Hamiltonian. Trong các công trình trước đây, chúng tôi đã tính hầu hết các yếu tố ma trận, trong công trình này yếu tố ma trận của thế nhiệt độ được tính bổ sung và thu được

$$\begin{aligned}
 (V_T)_{n,m}^{n',m'} = & (1-i)\sqrt{(n+m)(n+m-1)(n+m-2)(n-m)}\delta_{n'+m',n+m-3}\delta_{n'-m',n-m-1} \\
 & + (1-i)\sqrt{(n-m+3)(n-m+2)(n-m+1)(n+m+1)}\delta_{n'+m',n+m+1}\delta_{n'-m',n-m+3} \\
 & + (1+i)\sqrt{(n+m+3)(n+m+2)(n+m+1)(n-m+1)}\delta_{n'+m',n+m+3}\delta_{n'-m',n-m+1} \\
 & + (1+i)\sqrt{(n-m)(n-m-1)(n-m-2)(n+m)}\delta_{n'+m',n+m-1}\delta_{n'-m',n-m-2} \\
 & + (1+i)\sqrt{(n+m+1)(n+m+2)(4n-2m+3)}\delta_{n'+m',n+m+2}\delta_{n'-m',n-m} \\
 & + 3(1+i)\sqrt{(n-m)(n+m+1)(2n+1)}\delta_{n'+m',n+m+1}\delta_{n'-m',n-m-1} \\
 & + (1-i)\sqrt{(n+m)(n+m-1)(2n-2m+1)}\delta_{n'+m',n+m-2}\delta_{n'-m',n-m} \\
 & + (1+i)\sqrt{(n-m)(n-m-1)(4n+2m+1)}\delta_{n'+m',n+m}\delta_{n'-m',n-m-2} \\
 & + (1-i)\sqrt{(n-m+1)(n-m+2)(4n+2m+3)}\delta_{n'+m',n+m}\delta_{n'-m',n-m+2} \\
 & + 3(1-i)\sqrt{(n+m)(n-m+1)}\delta_{n'+m',n+m-1}\delta_{n'-m',n-m+1}
 \end{aligned} \tag{20}$$

$\delta_{j,j}$ là dấu Kronecker-delta và $i^2 = -1$.

Cuối cùng, chúng tôi khai triển hàm sóng $|\psi\rangle$ theo bộ hàm cơ sở (21)

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^N \sum_{|m|=0}^j C_{j,m} |j, m\rangle, \tag{21}$$

sau đó thay hàm sóng (23) vào phương trình (17) sẽ thu được phương trình trị riêng, véc-tơ riêng tổng quát

$$(\mathbb{H} - E\mathbb{R})\mathbb{C} = 0, \tag{22}$$

trong đó, \mathbb{H} , \mathbb{R} là ma trận Hamiltonian và toán tử \hat{R} . Vì hàm sóng (23) được khai triển từ tổng của $(N+1)^2$ số hạng nên các ma trận này là ma trận vuông có $(N+1)^2 \times (N+1)^2$ phần tử. Giải phương trình (24) sẽ thu được phổ năng lượng là các trị riêng E và các hằng số khai triển $C_{j,m}$ tương ứng. Kết quả này sẽ được trình bày ở phần Kết quả và thảo luận.

3. Kết quả và thảo luận

Trong phần này, chúng tôi sẽ trình bày kết quả về ảnh hưởng của nhiệt độ lên 3 mức năng lượng thấp $1s$, $2s$, $3s$ và thảo luận về cách tìm bán kính trung bình tương ứng cho đơn lớp WSe₂. Chúng tôi đã chọn các thông số cấu trúc cho đơn lớp này bao gồm tỉ số khối lượng hiệu dụng $m_e / m_h = 0.94$, chiều dài chắn $r_0 = 4.2086$ nm và hằng số điện môi $\kappa = 4.5$, khối lượng rút gọn $\mu = 0.2039m_0$. Ở đây, $m_0 = 9.1094 \times 10^{-31}$ kg là khối lượng của electron. Bảng 1 ghi lại kết quả thu được cho trường hợp nhiệt độ 0 K và 300 K tương ứng với từ trường từ 0 T đến 150 T.

Bảng 1. Mức năng lượng 1s, 2s, 3s thay đổi theo từ trường và nhiệt độ.

Đơn vị năng lượng là eV, từ trường là T và nhiệt độ là K

Từ trường	1s		2s		3s	
	0 K	300 K	0 K	300 K	0 K	300 K
0 T	-0.168552	-0.168552	-0.038554	-0.038554	-0.016552	-0.016552
100 T	-0.165807	-0.166005	-0.006750	-0.005202	0.060367	0.060075
150 T	-0.162581	-0.162972	0.020157	0.021711	0.105882	0.099790
Thay đổi	0.2%		7.7%		5.8%	

Từ Bảng 1 cho thấy, khi từ trường bằng 0 T độ lệch hai mức năng lượng 2s – 1s là 130 meV, và 3s – 2s là 22 meV cho cả hai trường hợp nhiệt độ 0 K và 300 K. Kết quả này trùng khớp với số liệu thực nghiệm của công trình (Stier et al., 2018). Tiếp tục tăng từ trường đến 150 T, ta thấy có sự thay đổi của phổ năng lượng giữa trường hợp nhiệt độ 0 K và 300K. Tuy sự thay đổi này khoảng 1% nhưng bán kính quỹ đạo của electron ở ba mức trên có sự thay đổi đáng kể, lên đến 54%. Cụ thể, chúng tôi đã làm khớp phổ năng lượng ba mức 1s, 2s, 3s theo bình phương của từ trường, $E(B) = E_0 + \sigma_{ns} B^2$ (Stier et al., 2018), trong vùng từ trường nhỏ thu được hệ số nghịch từ σ_{ns} và sau cùng thu được bán kính qua công thức $r_{ns} = \sqrt{8\mu\sigma_{ns}} / e$, với e là điện tích nguyên tố. Kết quả trình bày ở Bảng 2 cho thấy nhiệt độ có ảnh hưởng đáng kể lên hệ số nghịch từ và bán kính. Ví dụ ở mức 3s sự ảnh hưởng này là 137% đối với hệ số nghịch từ và 54% đối với bán kính trong trường hợp nhiệt độ 300 K.

Bảng 2. Hệ số nghịch từ và bán kính của ba mức 1s, 2s, 3s ở nhiệt độ 0 K và 300 K

Nhiệt độ	σ_{1s}		(Stier et al., 2018)	σ_{2s}		(Stier et al., 2018)	σ_{3s}		(Stier et al., 2018)
	($\mu\text{eV}/\text{T}^2$)	r_{1s} (nm)		($\mu\text{eV}/\text{T}^2$)	r_{2s} (nm)		($\mu\text{eV}/\text{T}^2$)	r_{3s} (nm)	
0 K	0.2773	1.604	1.67	4.8872	6.732	6.96	25.542	15.24	15.8
300 K	0.2558	1.540	--	5.5215	7.156	--	60.421	23.44	--
Thay đổi	8%	4%	--	13%	6%	--	137%	54%	--

Trong công trình này chúng tôi chỉ nghiên cứu sự ảnh hưởng của hiệu ứng nhiệt độ lên trạng thái s. Chúng tôi nhận thấy rằng hiệu ứng này có thể ảnh hưởng mạnh hơn ở các trạng thái p, d và sẽ được chúng tôi nghiên cứu trong công trình tiếp theo.

4. Kết luận

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã khảo sát sự ảnh hưởng của nhiệt độ lên ba mức năng lượng 1s, 2s, 3s. Chúng tôi đã khảo sát cụ thể cho hai trường hợp $m_e / m_h = 0.94$ tương ứng với đơn lớp WSe₂ trong phạm vi nhiệt độ lên tới 300 K và từ trường trong khoảng 0 T đến 150 T. Kết quả cho thấy, hiệu ứng nhiệt độ có ảnh hưởng lên phổ năng lượng ở trạng thái s dẫn đến sự thay đổi bán kính tương ứng và có thể quan sát được trong thí nghiệm hiện

nay. Đồng thời chúng tôi cũng chỉ ra rằng trong những tính toán chính xác không thể bỏ qua hiệu ứng này.

Chúng tôi cũng viết chương trình tính bằng ngôn ngữ FORTRAN để phát triển giải phương trình trị riêng có các yếu tố ma trận dạng số phức với độ chính xác 12 chữ số thập phân. Code chương trình có thể cung cấp miễn phí cho cộng đồng nghiên cứu.

- ❖ **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 trọng điểm cấp trường mã số CS.2019.19.43TD. Các tác giả chân thành cảm ơn GS. TSKH. Lê Văn Hoàng đã đặt vấn đề, hướng dẫn giải quyết, góp ý và chỉnh sửa cho bài báo.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Arora, A., Deilmann, T., Reichenauer, T., Kern, J., Michaelis De Vasconcellos, S., Rohlfing, M., & Bratschitsch, R. (2019). Excited-State Trions in Monolayer WS₂. *Physical Review Letters*, 123(16), 167401.
- Arora, A., Koperski, M., Nogajewski, K., Marcus, J., Faugeras, C., & Potemski, M. (2015). Excitonic resonances in thin films of WSe₂: from monolayer to bulk material. *Nanoscale*, 7(23), 10421.
- Cao, T.-X. H., Ly, D.-N., Hoang, N.-T. D., & Le, V. H. (2019). High-accuracy numerical calculations of the bound states of a hydrogen atom in a constant magnetic field with arbitrary strength. *Computer Physics Communications*, 240, 138.
- Chernikov, A., Berkelbach, T. C., Hill, H. M., Rigosi, A., Li, Y., Aslan, O. B., ... Heinz, T. F. (2014). Exciton Binding Energy and Nonhydrogenic Rydberg Series in Monolayer WS₂. *Physical Review Letters*, 113(7), 076802.
- 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.
- Feranchuk, I., Ivanov, A., Le, V. H., & Ulyanenkova, A. (2015). *Non-perturbative Description of Quantum Systems* (Vol. 894). Cham: Springer International Publishing.
- He, K., Kumar, N., Zhao, L., Wang, Z., Mak, K. F., Zhao, H., & Shan, J. (2014). Tightly bound excitons in monolayer WSe₂. *Physical Review Letters*, 113(2), 1.
- Hoang, D. N. T., Pham, D. L., & Le, V. H. (2013). Exact numerical solutions of the Schrödinger equation for a two-dimensional exciton in a constant magnetic field of arbitrary strength. *Physica B: Condensed Matter*, 423, 31-37.
- Hoang, N. T. D., Nguyen, D. A. P., Hoang, V. H., & Le, V. H. (2016). Highly accurate analytical energy of a two-dimensional exciton in a constant magnetic field. *Physica B: Condensed Matter*, 495, 16-20.
- Hoang, N. D., Ly, D. N., & Le, V. H. (2020). Comment on "Excitons, trions, and biexcitons in transition-metal dichalcogenides: Magnetic-field dependence." *Physical Review B*, 101(12), 127401.
- Keldysh, L. V. (1979). Coulomb interaction in thin semiconductor and semimetal films. *JETP Lett.*, 29(11), 658-660. Retrieved from jetpletters.ac.ru/ps/1458/article_22207.shtml

- Kylänpää, I., & Komsa, H. P. (2015). Binding energies of exciton complexes in transition metal dichalcogenide monolayers and effect of dielectric environment. *Physical Review B*, 92(20), 205418.
- Levi-Civita, T. (1956). *Opere Matematiche. Memorie e Note. Vol. II: 1901 - 1907*. Bologna: Nicola Zanichelli Editore.
- Ly, D. N., Hoang, N. D., & Le, V. H. (2021). Highly accurate energies of a plasma-embedded hydrogen atom in a uniform magnetic field. *Physics of Plasmas*, 28(6), 063301.
- Netlib.org. LAPACK: Linear Algebra PACKage. (n.d.). Subroutine DSYGVX.f. Retrieved from <http://www.netlib.org/lapack/explore-ht-ml/d2/d97/dsyevx-8f.html>
- 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.
- 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.

**TEMPERATURE EFFECT ON LOW ENERGY LEVEL OF NEUTRAL EXCITON
IN A UNIFORM MAGNETIC FIELD**

Ly Duy Nhat¹, Huynh Nguyen Thanh Truc², Phan Ngoc Hung¹

¹*Ho Chi Minh City University of Education, Vietnam*

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

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

Received: May 30, 2022; Revised: September 30, 2022; Accepted: October 11 2022

ABSTRACT

This article presents the temperature effect on the neutral exciton energy spectrum in the WSe₂ monolayer in the magnetic field by a new mechanism that was first investigated in this work. This mechanism is entirely different from the exciton-phonon mechanism studied by many previous works in the absence of magnetic fields. By separating the center of the mass movement for the neutral exciton and obtaining the correct Hamiltonian, we found a term related to temperature and magnetic fields that were ignored in previous studies. We numerically solved the Schrodinger equations using the Feranchuk-Komarov operator method for the 1s, 2s, and 3s states and investigated the effect of temperature on the energy spectrum. The results show that with a magnetic field of up to 100 Tesla, the exciton's energy at the 3s state at 300K can be nearly 6% different from that at 0K. We also calculated the exciton radius and found that it varies with temperature. For example, with a 100 Tesla magnetic field, the radius at 300K increased by more than 50% compared to at 0K. This result suggests that we have to investigate further the temperature effect on the physical properties of exciton in TMD monolayer.

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