TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM TP HỒ CHÍ MINH
TẠP CHÍ KHOA HỌC
ISSN: 1859-3100
KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ CÔNG NGHỆ
Tập 16, Số 6 (2019): 72-80

HO CHI MINH CITY UNIVERSITY OF EDUCATION
JOURNAL OF SCIENCE
NATURAL SCIENCES AND TECHNOLOGY
Vol. 16, No. 6 (2019): 72-80

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

YẾU TỐ MA TRẬN CHO EXCITON HAI CHIỀU TRONG ĐIỆN TRƯỜNG

Phạm Thị Mỹ Hảo, Nguyễn Thị Thùy Trang, Hoàng Đỗ Ngọc Trầm*

Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh

** Tác giả liên hệ: Hoàng Đỗ Ngọc Trầm – Email: tramhdn@hcmue.edu.vn*

Ngày nhận bài: 06-11-2018; ngày nhận bài sửa: 17-11-2018; ngày duyệt đăng: 16-5-2019

TÓM TẮT

Phương pháp toán tử FK được sử dụng để giải phương trình Schrödinger cho exciton hai chiều trong điện trường đều. Phép biến đổi Levi-Civita được sử dụng để chọn bộ hàm sóng cơ sở cho bài toán dưới dạng dao động tử điều hòa. Kết quả thu được các yếu tố ma trận của Hamiltonian, là cơ sở để xác định nghiệm số chính xác cho bài toán.

Từ khóa: exciton, hai chiều, phép biến đổi Levi-Civita, phương pháp toán tử FK, yếu tố ma trận.

1. Mở đầu

Kể từ sau thành công của graphene, một loạt các vật liệu hai chiều (2D), ví dụ transition metal dichalcogenides (TMDs), hexagonal boron-nitride (h-BN)… đã được phát hiện. Dù graphene đã mang lại những tính chất độc đáo nhưng vì có năng lượng vùng cấm bằng không đã làm hạn chế những ứng dụng của chúng. Nên sau đó, sự khám phá ra đơn lớp TMDs với năng lượng vùng cấm trực tiếp nằm khoảng trong vùng gần hồng ngoại đến khả kiến, đã thu hút được rất nhiều sự quan tâm. Do đó, nghiên cứu về TMDs ngày càng tăng và chiếm tỉ lệ khá cao trong số lượng công bố nghiên cứu về vật liệu 2D. TMDs đơn lớp bao gồm một đơn lớp của nguyên tử kim loại chuyển tiếp được kẹp giữa hai lớp nguyên tử chalcogen trong cấu trúc lăng trụ tam giác. Hiện nay, các nghiên cứu về đơn lớp TMDs thuộc nhóm VI đang được chú ý bao gồm MoS_2, $MoSe_2$, WS_2, và WSe_2. Đây là chất bán dẫn với những tính chất quang học và điện tử đặc biệt, hứa hẹn có nhiều ứng dụng trong lĩnh vực quang điện tử ví dụ như tế bào quang điện, diode phát quang… Các nghiên cứu cũng chỉ ra rằng dịch chuyển quang học chủ yếu trong TMDs là hình thành exciton (Choi et al., 2017).

Exciton là một chuẩn hạt được tạo thành khi có tương tác Coulomb giữa điện tử mang điện tích âm và lỗ trống mang điện tích dương, tương tự nguyên tử hydro. Trong TMDs, exciton được tạo thành khi một photon được hấp thụ, kích thích điện tử từ vùng hóa trị lên vùng dẫn và để lại một lỗ trống mang điện tích dương. Sau đó, điện tử và lỗ trống kết hợp với nhau bằng tương tác Coulomb tạo thành chuẩn hạt exciton đồng thời phát ra một photon. Exciton có ý nghĩa đặc biệt với 2D TMDs. Khi số chiều của hệ vật lí giảm đi, tương tác Coulomb giữa điện tử và lỗ trống được tăng cường (Xiao, Zhao, Wang, &

Zhang, 2017), kéo theo việc hình thành exciton và các hiệu ứng liên quan chiếm ưu thế. Các hiệu ứng này là cơ sở để chế tạo một số thiết bị ở kích thước nano ví dụ như: laser exciton, nguồn photon đơn…(Wu, Cheng, & Wang, 2017).

Phổ năng lượng của exciton là thông tin để tìm hiểu trực tiếp về tính chất vật lí trong chất bán dẫn. Nó cũng là nền tảng để nhận biết hiệu ứng của exciton trong thí nghiệm phổ quang học. Vì thế, việc nghiên cứu phổ năng lượng rất có ý nghĩa. Tuy nhiên, dù tương tác giữa điện tử và lỗ trống tăng đáng kể khi số chiều của hệ giảm đi (Huang, Liang, & Yang, 2013), năng lượng của exciton ở trạng thái kích thích cao vẫn khó đo trong thực nghiệm (Miller, Kleinman, Tsang, & Gossard, 1981). Vì thế người ta thường tìm cách đặt trường ngoài bao gồm điện trường hoặc từ trường vào để dễ dàng quan sát các vạch phổ. Ngoài ra, điện trường song song có cường độ lớn khi đặt vào các vật liệu khác nhau là một phương pháp hiệu quả để điều chỉnh tính chất quang học của chúng. Ví dụ khi khảo sát phổ quang phát quang của đơn lớp và hai lớp WS_2 trong trường hợp đặt điện trường song song, kết quả cho thấy là khi tăng cường độ điện trường đối với đơn lớp WS_2 thì dẫn đến dập tắt quang phát quang (PL quenching) trong khi đối với hai lớp WS_2 thì làm tăng phát xạ quang phát quang (He et al., 2015); khám phá này có thể giúp ích rất nhiều trong việc phát triển hiệu quả hơn các các thiết bị quang điện tử dựa trên cơ sở vật liệu 2D TMDs. Trong một số nghiên cứu, điện trường ngoài có cường độ lớn được sử dụng để điều chỉnh năng lượng vùng cấm của hai lớp graphene, hai lớp TMDs… (Ramasubramaniam, Naveh, & Towe, 2011). Thêm vào đó, điện trường đóng vai trò quan trọng trong các quá trình ion hóa trong TMDs. Trong những vật liệu có năng lượng liên kết exciton lớn như TMDs, việc ion hóa bằng nhiệt không hiệu quả nên thay vào đó người ta thường sử dụng điện trường mạnh (Pedersen, Latini, Thygesen, Mera, & Nikolić, 2016). Ngoài ra, thì việc đặt điện trường ngoài vào giúp ta có thể quan sát hiệu ứng vật lí quen thuộc như hiệu ứng Stark (Scharf et al., 2016). Từ đó, ta có thể nói bài toán exciton hai chiều trong điện trường với các cường độ khác nhau đóng vai trò quan trọng đối với cả lí thuyết và thực nghiệm.

Phương pháp toán tử FK (viết tắt là FK - OM) được đưa ra bởi nhóm nghiên cứu của giáo sư Komarov ở Đại học Belarus (Feranchuk & Komarov, 1982). Phương pháp này đã ứng dụng thành công cho các bài toán hệ nguyên tử hai chiều trong từ trường đều (Feranchuk, Ivanov, Le, & Ulyanenkov, 2015). Việc tiếp tục áp dụng FK – OM cho bài toán hệ nguyên tử hai chiều trong điện trường là một hướng phát triển mới và có ý nghĩa. Trong công trình này, chúng tôi bước đầu áp dụng FK – OM cho bài toán exciton trong điện trường để tính toán yếu tố ma trận của Hamiltonian, đây là cơ sở để xác định nghiệm chính xác bằng số cho bài toán.

2. Phương trình Schrödinger của exciton hai chiều

Ở trong phần này, đầu tiên chúng tôi sẽ xây dựng phương trình Schrödinger dạng không thứ nguyên cho exciton hai chiều đặt trong điện trường đều trong không gian (x, y). Tiếp theo, phương trình này sẽ được chuyển về dạng phương trình dao động tử phi điều hòa trong không (u,v) bằng cách sử dụng phép biến đổi Levi-Civita. Cuối cùng, chúng tôi viết lại phương trình thu được trong biểu diễn theo các toán tử sinh hủy để thuận lợi cho các tính toán đại số.

2.1. Mối liên hệ với phương trình dao động tử phi điều hòa

Phương trình Schrödinger không thứ nguyên cho exciton hai chiều trong điện trường đều có cường độ điện trường $\vec{\varepsilon}=\left(\varepsilon_1,\varepsilon_2,0\right)$ có dạng như sau:

$$\hat{H}\psi\left(x,y\right)=E\psi\left(x,y\right), \tag{1}$$

$$\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)-\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}}+\beta_1 x+\beta_2 y\right]\psi\left(x,y\right)=E\psi\left(x,y\right), \tag{2}$$

Ở đây, đơn vị của năng lượng là hằng số Rydberg hiệu dụng $R^*=\dfrac{e^4\mu^*}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}$, đơn vị độ dài là bán kính Bohr hiệu dụng $a=\dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{e^2\mu^*}$. Cường độ điện trường không thứ nguyên β_1,β_2 lần lượt được xác định bằng biểu thức: $\beta_1=\dfrac{ea\varepsilon_1}{R^*},\beta_2=\dfrac{ea\varepsilon_2}{R^*}$.

Ta sẽ giải phương trình (2) bằng phương pháp toán tử FK dựa trên ý tưởng lí thuyết nhiễu loạn với thành phần chính là dao động tử điều hòa. Các nghiên cứu trước (Feranchuk & Komarov, 1982) đã chỉ ra mối liên hệ giữa bài toán nguyên tử trong không gian $\left(x,y\right)$ với bài toán dao động tử phi điều hòa trong không gian $\left(u,v\right)$ thông qua phép biến đổi Levi-Civita:

$$\begin{cases} x=u^2-v^2, \\ y=2uv, \end{cases} \tag{3}$$

với $dxdy=4\left(x^2+y^2\right)dudv\,,r=\sqrt{x^2+y^2}=u^2+v^2$.

Ta sẽ sử dụng phép biến đổi này để viết lại phương trình Schrödinger cho bài toán:

$$\tilde{H}\Psi\left(u,v\right)=0\,, \tag{4}$$

trong đó

$$\tilde{H}=r\left(\hat{H}-E\right)$$

có dạng Hamiltonian của dao động tử phi điều hòa trong không gian hai chiều $\left(u,v\right)$:

$$\tilde{H}=-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u^2}+\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right)+\beta_1\left(u^4-v^4\right)+2\beta_2 uv\left(u^2+v^2\right)-E\left(u^2+v^2\right)-1 \tag{5}$$

2.2. Phương pháp đại số

Phương pháp đại số sẽ được sử dung để giải phương trình Schrödinger (4)-(5) thông qua các toán tử sinh, hủy Dirac được định nghĩa lần lượt sau đây:

$$\hat{u}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(u+\frac{\partial}{\partial u}\right),\qquad \hat{u}^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(u-\frac{\partial}{\partial u}\right),$$
$$\hat{v}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(v+\frac{\partial}{\partial v}\right),\qquad \hat{v}^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(v-\frac{\partial}{\partial v}\right), \tag{6}$$

Các toán tử này thỏa mãn hệ thức giao hoán $\left[\hat{u},\hat{u}^{+}\right]=1,\left[\hat{v},\hat{v}^{+}\right]=1$.

Khi sử dụng phương pháp toán tử FK người ta thường quan tâm đến tính đối xứng của bài toán. Trong các bài toán exciton hai chiều, exciton hai chiều trong từ trường vuông góc… thì hình chiếu moment động lượng quỹ đạo lên trục Oz bảo toàn, nghĩa là toán tử Hamilton và toán tử hình chiếu moment động lượng quỹ đạo lên trục Oz ($\hat{L}_z$) giao hoán với nhau. Vì thế ta sẽ sử dụng bộ hàm sóng cơ sở là các hàm riêng của toán tử $\hat{L}_z$. Cách đơn giản nhất để thực hiện điều này là định nghĩa toán tử sinh hủy mới là tổ hợp tuyến tính của toán tử sinh hủy cũ sao cho $\hat{L}_z$ có dạng trung hòa. Mặc dù đối với bài toán này, do ảnh hưởng của điện trường nên đại lượng này không bảo toàn, nhưng để thống nhất với các công trình trước (Nguyen & Hoang, 2018), ta vẫn sẽ sử dụng bộ hàm sóng cơ sở là các hàm riêng của toán tử $\hat{L}_z$ để tính toán.

Ta định nghĩa các toán tử sinh hủy mới nhằm chéo hóa $\hat{L}_z$ như sau:

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

Các toán tử này cũng thỏa mãn hệ thức giao hoán: $\left[\hat{a},\hat{a}^{+}\right]=1,\left[\hat{b},\hat{b}^{+}\right]=1$.

Ở đây, ta đưa vào các toán tử (6) một tham số tự do, đóng vai trò điều chỉnh tốc độ hội tụ. Tham số này sẽ không ảnh hưởng đến kết quả bài toán vì nó không có mặt trong toán tử Hamilton toàn phần mà chỉ xuất hiện trong thành phần chính và thành phần nhiễu loạn, nó đóng vai trò điều chỉnh sự chênh lệch độ lớn giữa hai thành phần này nhằm thỏa mãn điều kiện nhiễu loạn, do đó cũng làm tăng tốc độ hội tụ của bài toán.

Toán tử Hamilton (5) được biểu diễn dưới dạng toán tử sinh hủy (7) như sau:

$$\tilde{H} = \tilde{H}^R - E\tilde{R} \ , \tag{8}$$

với

$$\begin{aligned}\tilde{H}^R &= \frac{\omega}{8}\left(\hat{N} - \hat{M} - \hat{M}^+\right) + \frac{\beta_1}{2\omega^2}\left(\hat{N} + \hat{M} + \hat{M}^+\right)\left(\hat{a}^2 + \hat{a}^{+2} + \hat{b}^2 + \hat{b}^{+2} + 2\hat{a}\hat{b}^+ + 2\hat{a}^+\hat{b}\right) \\ &- \frac{i\beta_2}{2\omega^2}\left(\hat{N} + \hat{M} + \hat{M}^+\right)\left(\hat{a}^2 - \hat{a}^{+2} - \hat{b}^2 + \hat{b}^{+2} + 2\hat{a}\hat{b}^+ - 2\hat{a}^+\hat{b}\right) - 1,\end{aligned} \tag{9}$$

$$\hat{R} = \frac{1}{\omega}\left(\hat{N} + \hat{M} + \hat{M}^+\right). \tag{10}$$

trong đó các toán tử mới $\hat{M}, \hat{M}^+, \hat{N}$ được định nghĩa lại như sau:

$$\hat{M} = \hat{a}\hat{b}, \quad \hat{M}^+ = \hat{a}^+\hat{b}^+, \quad \hat{N} = \left(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b} + 1\right). \tag{11}$$

Khi đó ta thu được toán tử hình chiếu moment động lượng quỹ đạo dưới dạng toán tử trung hòa:

$$\hat{L}_z = -\frac{1}{2}\left(\hat{a}^+\hat{a} - \hat{b}^+\hat{b}\right). \tag{12}$$

3. Bộ hàm sóng cơ sở

Bộ hàm sóng được chọn là nghiệm riêng của toán tử trung hòa như sau:

$$\left|n_1, n_2\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!}}\left(\hat{a}^+\right)^{n_1}\left(\hat{b}^+\right)^{n_2}\left|0(\omega)\right\rangle, \tag{13}$$

với n_1, n_2 là các số nguyên không âm và trạng thái chân không được định nghĩa từ các phương trình sau:

$$\hat{a}(\omega)\left|0(\omega)\right\rangle = 0, \qquad \hat{b}(\omega)\left|0(\omega)\right\rangle = 0, \qquad \left\langle 0(\omega)\middle|0(\omega)\right\rangle = 0. \tag{14}$$

Ta sẽ xác định nghiệm của phương trình (8)-(9) dưới dạng tổ hợp tuyến tính của các hàm sóng cơ sở (13) như sau:

$$\left|\psi_{n_1,n_2}\right\rangle = \left|n_1, n_2\right\rangle + \sum_{\substack{j=0 \\ j\neq n_1}}^{+\infty}\sum_{\substack{k=0 \\ k\neq n_2}}^{+\infty} C_{jk}\left|j,k\right\rangle \ . \tag{15}$$

4. Các yếu tố ma trận của Hamiltonian

Ta giải phương trình (4) với hàm sóng khai triển (15), khi đó phương trình được viết lại:

$$\tilde{H}^R\left(\left|n_1,n_2\right\rangle+\sum_{\substack{j=0\\ j\neq n_1}}^{+\infty}\sum_{\substack{k=0\\ k\neq n_2}}^{+\infty}C_{jk}\left|j,k\right\rangle\right)=E_{n_1n_2}\tilde{R}\left(\left|n_1,n_2\right\rangle+\sum_{\substack{j=0\\ j\neq n_1}}^{+\infty}\sum_{\substack{k=0\\ k\neq n_2}}^{+\infty}C_{jk}\left|j,k\right\rangle\right) \tag{16}$$

Nhân trái hai vế (16) với $\left\langle j',k'\right|$, ta có:

$$\left\langle j',k'\right|\tilde{H}^R\left(\left|n_1,n_2\right\rangle+\sum_{\substack{j=0\\ j\neq n_1}}^{+\infty}\sum_{\substack{k=0\\ k\neq n_2}}^{+\infty}C_{jk}\left|j,k\right\rangle\right)=E_{n_1n_2}\left\langle j',k'\right|\tilde{R}\left(\left|n_1,n_2\right\rangle+\sum_{\substack{j=0\\ j\neq n_1}}^{+\infty}\sum_{\substack{k=0\\ k\neq n_2}}^{+\infty}C_{jk}\left|j,k\right\rangle\right)$$

hay

$$H^R_{\substack{n_1j'\\ n_2k'}}+\sum_{\substack{j=0\\ j\neq n_1}}^{+\infty}\sum_{\substack{k=0\\ k\neq n_2}}^{+\infty}C_{jk}H^R_{\substack{jj'\\ kk'}}=E_{n_1n_2}\left(R_{\substack{n_1j'\\ n_2k'}}+\sum_{\substack{j=0\\ j\neq n_1}}^{+\infty}\sum_{\substack{k=0\\ k\neq n_2}}^{+\infty}C_{jk}R_{\substack{jj'\\ kk'}}\right), \tag{17}$$

trong đó $H^R_{\substack{jj'\\ kk'}}, R_{\substack{jj'\\ kk'}}$ là các yếu tố ma trận được định nghĩa như sau :

$$\begin{aligned} H^R_{\substack{jj'\\ kk'}}&=\left\langle j',k'\right|\tilde{H}^R\left|j,k\right\rangle=\iint\psi^*_{j',k'}\tilde{H}^R\psi_{j,k}dV,\\ R_{\substack{jj'\\ kk'}}&=\left\langle j',k'\right|\tilde{R}\left|j,k\right\rangle=\iint\psi^*_{j',k'}\tilde{R}\psi_{j,k}dV.\end{aligned} \tag{18}$$

Khi đã xác định được các yếu tố ma trận (18), phương trình (17) có thể được giải bằng cách áp dụng sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn hoặc cũng có thể giải trực tiếp như hệ phương trình tuyến tính.

5. Kết quả

Chúng tôi tiến hành các tính toán đại số để tìm biểu thức cụ thể của các yếu tố ma trận (18), làm cơ sở cho việc xác định nghiệm số chính xác của bài toán. Kết quả thu được biểu thức của các yếu tố ma trận khác không như sau:

4.1. Yếu tố ma trận của $\tilde{R}$

$$\begin{aligned} R_{\substack{n_1,n_1\\ n_2,n_2}}&=\frac{1}{\omega}\left(n_1+n_2+1\right),\\ R_{\substack{n_1,n_1+1\\ n_2,n_2+1}}&=\frac{1}{\omega}\sqrt{\left(n_1+1\right)\left(n_2+1\right)}.\end{aligned} \tag{19}$$

4.2. Yếu tố ma trận của $\tilde{H}$

$$
\begin{aligned}
&H^R_{\substack{n_1,n_1\\ n_2,n_2}} = \frac{\omega}{8}\left(n_1+n_2+1\right)-1,\\
&H^R_{\substack{n_1,n_1+1\\ n_2,n_2+1}} = -\frac{\omega}{8}\sqrt{\left(n_1+1\right)\left(n_2+1\right)},\\
&H^R_{\substack{n_1,n_1-1\\ n_2,n_2+1}} = 3\left(\beta_1-\beta_2 i\right)\frac{1}{2\omega^2}\left(n_1+n_2+1\right)\sqrt{n_1\left(n_2+1\right)},\\
&H^R_{\substack{n_1,n_1+2\\ n_2,n_2}} = \left(\beta_1+\beta_2 i\right)\frac{1}{2\omega^2}\left(n_1+3n_2+3\right)\sqrt{\left(n_1+1\right)\left(n_1+2\right)},\\
&H^R_{\substack{n_1,n_1\\ n_2,n_2+2}} = \left(\beta_1-\beta_2 i\right)\frac{1}{2\omega^2}\left(3n_1+n_2+3\right)\sqrt{\left(n_2+1\right)\left(n_2+2\right)},\\
&H^R_{\substack{n_1,n_1+3\\ n_2,n_2+1}} = \left(\beta_1+\beta_2 i\right)\frac{1}{2\omega^2}\sqrt{\frac{\left(n_1+3\right)!}{n_1!}}\sqrt{\left(n_2+1\right)},\\
&H^R_{\substack{n_1,n_1+1\\ n_2,n_2+3}} = \left(\beta_1-\beta_2 i\right)\frac{1}{2\omega^2}\sqrt{\frac{\left(n_2+3\right)!}{n_2!}}\sqrt{\left(n_1+1\right)}.
\end{aligned}
\tag{20}
$$

Các yếu tố ma trận trên khác không khác có thể xác định dựa vào tính chất của toán tử hermit:

$$
R_{\substack{n_1,n_1'\\ n_2,n_2'}} = R_{\substack{n_1',n_1\\ n_2,n_2'}}, \qquad H^R_{\substack{n_1,n_1'\\ n_2,n_2'}} = (H^R_{\substack{n_1',n_1\\ n_2,n_2'}})^*.
$$

Các yếu tố ma trận $\tilde{H}$ trong công thức (20) có chứa cả phần thực lẫn phần ảo. Điều này dự đoán năng lượng của exciton cũng có dạng phức $E = \Delta - i\Gamma/2$, phù hợp với bản chất vật lí của hệ nguyên tử trong điện trường ngoài, trong đó thành phần ảo đặc trưng cho xác suất ion hóa xuyên ngầm Γ của nguyên tử (Pedersen et al., 2016), là một đại lượng có ý nghĩa trong việc xác định các tính chất vật lí của hệ.

6. Kết quả:

Như vậy trong công trình này, chúng tôi đã xây dựng được phương trình Schrödinger cho exciton hai chiều trong điện trường và áp dụng phương pháp toán tử FK để giải bài toán. Kết quả là thu được các yếu tố ma trận của Hamiltonian, là cơ sở để xác định nghiệm số chính xác cho exciton hai chiều trong điện trường.

❖ ***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 Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh trong đề tài cơ sở mã số CS2016.19.13.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Choi, W., Choudhary, N., Han, G. H., Park, J., Akinwande, D., & Lee, Y. H. (2017). Recent development of two-dimensional transition metal dichalcogenides and their applications. *Materials Today*, *20*(3), 116-130. https://doi.org/10.1016/j.mattod.2016.10.002

Feranchuk, I. D., & Komarov, L. I. (1982). The operator method of the approximate solution of the Schrödinger equation. *Physics Letters A*, *88*(5), 211-214. https://doi.org/10.1016/0375-9601(82)90229-8

Feranchuk, I. D., Ivanov, A., Le, V.-H., & Ulyanenkov, A. (2015). *Nonperturbative description of quantum systems* (Vol. 894; I. Feranchuk, A. Ivanov, V.-H. Le, & A. Ulyanenkov, Eds.). https://doi.org/10.1007/978-3-319-13006-4

He, Z., Sheng, Y., Rong, Y., Lee, G. Do, Li, J., & Warner, J. H. (2015). Layer-dependent modulation of tungsten disulfide photoluminescence by lateral electric fields. *ACS Nano*, *9*(3), 2740–2748. https://doi.org/10.1021/nn506594a

Huang, S., Liang, Y., & Yang, L. (2013). Exciton spectra in two-dimensional graphene derivatives. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, *88*(7), 075441-075446. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.075441

Miller, R. C., Kleinman, D. A., Tsang, W. T., & Gossard, A. C. (1981). Observation of the excited level of excitons in GaAs quantum wells. *Physical Review B*, *24*(2), 1134-1136. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.24.1134

Nguyễn, Phương Duy Anh, Hoàng, Đỗ Ngọc Trầm (2018). Yếu tố ma trận cho nguyên tử heli hai chiều. *Tạp chí Khoa học Trường ĐHSP TPHCM, 15*(9), 22-34

Pedersen, T. G., Latini, S., Thygesen, K. S., Mera, H., & Nikolić, B. K. (2016). Exciton ionization in multilayer transition-metal dichalcogenides. *New Journal of Physics*, *18*(7), 073043-11. https://doi.org/10.1088/1367-2630/18/7/073043

Ramasubramaniam, A., Naveh, D., & Towe, E. (2011). Tunable band gaps in bilayer transition-metal dichalcogenides. *Physical Review B*, *84*(20), 205325-10.

Scharf, B., Frank, T., Gmitra, M., Fabian, J., Žutić, I., & Perebeinos, V. (2016). Excitonic Stark effect in MoS_2 monolayers. *Physical Review B*, *94*(24), 245434-8. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.245434

Wu, S., Cheng, L., & Wang, Q. (2017). Excitonic effects and related properties in semiconductor nanostructures: Roles of size and dimensionality. *Materials Research Express*, *4*(8), 08517–13. https://doi.org/10.1088/2053-1591/aa81da

Xiao, J., Zhao, M., Wang, Y., & Zhang, X. (2017). Excitons in atomically thin 2D semiconductors and their applications. *Nanophotonics*, *6*(6), 1309–1328. https://doi.org/10.1515/nanoph-2016-0160

MATRIX ELEMENTS FOR TWO-DIMENSIONAL EXCITON IN AN ELECTRIC FIELD

Pham Thi My Hao, Nguyen Thi Thuy Trang, Hoang Do Ngoc Tram*

Ho Chi Minh City University of Education

* *Corresponding author: Hoang Do Ngoc Tram – Email: tramhdn@hcmue.edu.vn*

Received: 06/11/2019; Revised: 17/11/2019; Accepted: 16/5/2019

ABSTRACT

The FK operator method is applied to solve the Schrödinger equation for a two-dimensional exciton in a uniform electric field. The Levi-Civita transformation is used to construct the basic set of wave functions under the form of harmonic oscillator ones. That the matrix elements of Hamiltonian are obtained allows retrieving the exact numerical solution of the problem.

Keywords: exciton, two-dimensional, Levi-Civita transformation, FK operator method, matrix element.