



**BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO  
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH**

**KHOA VẬT LÝ**  
**୧୦୦୦୩**

**KHÓA LUẬN TỐT NGHIỆP**

# **PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ CHO BÀI TOÁN EXCITON HAI CHIỀU**

**Giáo viên hướng dẫn:**

**ThS. HOÀNG ĐỖ NGỌC TRÂM**

**Sinh viên thực hiện:**

**TRƯƠNG MẠNH TUẤN**

**Tp. HỒ HỒ CHÍ MINH 05/2010**

## Lời cảm ơn

*Trong quá trình thực hiện và hoàn thành khóa luận này, ngoài những nỗ lực của bản thân, tôi đã nhận được sự quan tâm giúp đỡ và động viên của quý thầy cô trong khoa Vật lý trường Đại học Sư phạm thành phố Hồ Chí Minh*

*Tôi xin được bày tỏ lòng biết ơn chân thành tới ThS. Hoàng Đỗ Ngọc Trâm - giáo viên hướng dẫn luận văn này – cô đã tận tình hướng dẫn, truyền thụ cho tôi những kiến thức bổ ích, những kinh nghiệm quý báu để tôi thực hiện khóa luận này, đồng thời truyền cho tôi lòng nhiệt tình trong nghiên cứu khoa học.*

*Tôi cũng xin được cảm ơn anh Lê Quý Giang, chị Nguyễn Thị Mận và các thành viên cùng đề tài Nghiên cứu khoa học đã hướng dẫn, giúp đỡ tôi trong việc lập trình với ngôn ngữ lập trình FORTRAN 77.*

*Xin cảm ơn gia đình, người thân đã hỗ trợ tinh thần tôi có thể hoàn thành khóa luận này.*

*Một lần nữa tôi xin chân thành cảm ơn.*

**Trương Mạnh Tuấn**

# MỞ ĐẦU

Ngày nay với sự phát triển như vũ bão của khoa học kỹ thuật, các hệ lượng tử được xét đến ngày càng đa dạng, trong đó có nhiều bài toán chưa tìm được lời giải, từ đó phát sinh nhu cầu xây dựng và phát triển các phương pháp giải các bài toán cơ học lượng tử - cụ thể là giải các phương trình Schrödinger. Một trong những phương pháp mạnh và phổ biến có thể kể đến là phương pháp lý thuyết nhiễu loạn. Ý tưởng chính của lý thuyết nhiễu loạn là tách Hamiltonian của bài toán thành hai thành phần: một phần có thể xác định được nghiệm chính xác, phần còn lại là “nhiễu loạn” sẽ đóng góp vào kết quả thông qua các bổ chính; trong đó điều kiện áp dụng là thành phần “nhiễu loạn” phải nhỏ so với thành phần chính. Đây cũng chính là hạn chế lớn của phương pháp này, vì trong thực tế một số trường hợp thành phần tách ra không đủ nhỏ để coi là “nhiễu loạn”. Như vậy, việc xây dựng một phương pháp để giải các bài toán phi nhiễu loạn là cần thiết.

Phương pháp toán tử (Operator Method, viết tắt là OM) được xây dựng từ thập niên 80 của thế kỷ trước. Đây là một trong các phương pháp mạnh cho một dải rất rộng các bài toán phi nhiễu loạn nêu trên [7].

Ý tưởng chính của OM [7] nằm trong bốn bước sau: (1) - Biểu diễn toán tử Hamiltonian qua các toán tử sinh hủy:  $H(x, p) \rightarrow H(\hat{a}, \hat{a}^+, \omega)$ ; (2) - Tách Hamiltonian thành phần trung hòa và không trung hòa:  $H(\hat{a}, \hat{a}^+, \omega) = H_0(\hat{a}^+ \hat{a}, \omega) + V(\hat{a}, \hat{a}^+, \omega)$ ; (3) - Chọn tham số  $\omega$  sao cho  $H_0(\hat{a}^+ \hat{a}, \omega)$  là thành phần chính của Hamiltonian và từ đây ta có nghiệm riêng của  $H_0(\hat{a}^+ \hat{a}, \omega)$  là năng lượng gần đúng bậc không; (4)- Xem  $V(\hat{a}, \hat{a}^+, \omega)$  là thành phần nhiễu loạn và tính các bổ chính bậc cao theo các sơ đồ thích hợp.

Qua nghiên cứu và ứng dụng trong một loạt các bài toán cụ thể về lý thuyết trường, chất rắn, vật lý nguyên tử... OM đã chứng tỏ tính ưu việt và hiệu quả của nó [7]. Một số ưu điểm có thể kể ra như: (1) - Đơn giản hóa việc tính toán các yếu tố ma trận phức tạp, đưa về các phép biến đổi thuần đại số. Vì vậy có thể sử dụng các chương trình

tính toán trên biểu tượng như Matlab, Mathematica để tự động hóa quá trình tính toán;  
(2) - Cho phép xét các hệ lượng tử với trường ngoài có cường độ bất kì. Từ đây có thể tìm giá trị năng lượng và hàm sóng của hệ trong toàn miền thay đổi của tham số trường ngoài.

Một trong những khó khăn chung khi áp dụng OM là đa phần các bài toán có toán tử Hamilton chứa các biến động lực ở mẫu số hoặc trong dấu căn nên nếu đơn thuần chuyển sang biểu diễn các toán tử sinh hủy thì sẽ gây khó khăn khi tính toán. Để giải quyết vấn đề này, trong các công trình trước [2], [7] các tác giả đã sử dụng mối liên hệ giữa bài toán nguyên tử hydro và bài toán dao động tử điều hòa thông qua phép biến đổi Levi-Civita giúp đưa các phương trình về dạng bài toán dao động tử phi hòa khá quen thuộc – cách giải này khá “đẹp mắt” về hình thức và cũng đã phát huy tác dụng đối với một số bài toán [7]. Tuy nhiên, đối với các bài toán phức tạp hơn, việc xác định năng lượng một cách gián tiếp như vậy gây một số khó khăn khi tính toán, lập trình để tìm nghiệm. Do đó, trong đề tài này tôi sử dụng phương pháp toán tử tìm năng lượng  $E$  một cách trực tiếp bằng cách sử dụng phép biến đổi Laplace để đưa phân tọa độ ra khỏi mẫu số và dấu căn. Đây được coi là một bước phát triển OM.

Với ý nghĩa đóng góp vào sự phát triển của OM, luận văn này chỉ áp dụng OM cho một bài toán đơn giản, dễ dàng tìm nghiệm chính xác bằng phương pháp giải tích để tiện đối chiếu, so sánh và rút ra kết luận: bài toán exciton hai chiều, từ đó có cơ sở để áp dụng cho các bài toán phức tạp hơn sau này. Tuy đây là bài toán đơn giản nhưng cũng là một bài toán được quan tâm do ý nghĩa thực tiễn của nó [3], [8].

Một trong những khâu quan trọng khi sử dụng OM là chọn giá trị tham số tự do  $\omega$ , việc chọn  $\omega$  phù hợp sẽ tối ưu hóa tốc độ tính toán do đó khảo sát sự hội tụ của phương pháp theo tham số  $\omega$  là một nhiệm vụ quan trọng.

Với mục tiêu là tìm hiểu sâu hơn về một số vấn đề trong cơ học lượng tử và bước đầu làm quen với việc nghiên cứu khoa học, tác giả tự đặt ra cho mình các nhiệm vụ như sau:

- Tìm hiểu về lý thuyết nhiễu loạn, cụ thể là nhiễu loạn dừng, tính lại sơ đồ xác định các bổ chính năng lượng, hàm sóng, áp dụng cho một bài toán phổ biến trong cơ học lượng tử là bài toán dao động tử phi điều hòa.

- Tìm hiểu về OM (sơ đồ tính toán, các ưu điểm..) trên cơ sở đối chiếu, so sánh với phương pháp lý thuyết nhiễu loạn thông qua việc giải bài toán dao động tử phi điều hòa.

- Hoàn thiện các kỹ năng tính toán: tính toán trên các toán tử sinh hủy, biến đổi giải tích.

- Bước đầu làm quen với ngôn ngữ lập trình (FORTRAN 77, 90).

- Đưa ra lời giải cho bài toán exciton hai chiều bằng phương pháp toán tử, so sánh với kết quả thu được bằng lời giải giải tích.

- Khảo sát tính hội tụ của phương pháp toán tử theo tham số  $\omega$ .

### Phương pháp nghiên cứu:

- Tính toán đại số để tìm biểu thức giải tích.

- Sử dụng ngôn ngữ lập trình FORTRAN 77 để tìm nghiệm số.

- Đối chiếu, so sánh kết quả số thu được bằng lời giải giải tích và lời giải theo OM.

Bố cục của luận văn được tác giả chia làm 4 chương:

### Chương 1: Giới thiệu phương pháp toán tử qua bài toán dao động tử phi điều hòa

Tác giả giới thiệu OM thông qua ví dụ bài toán dao động tử phi điều hòa, đồng thời đối chiếu với phương pháp lý thuyết nhiễu loạn truyền thống để thấy được tính hiệu quả của phương pháp này. Trước hết tác giả viết lại sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn Rayleigh-Schrödinger và áp dụng cho bài toán nêu trên. Sau đó tác giả đưa ra các bước cơ bản của OM và áp dụng cho cùng một bài toán. Kết quả bằng số cho thấy phương pháp nhiễu loạn chỉ áp dụng được cho trường hợp tham số phi điều hòa  $\lambda \ll 0.1$  trong khi phương pháp toán tử cho kết quả hội tụ nhanh hơn nhiều lần và đúng cho mọi giá trị của tham số  $\lambda$ . Chúng ta sẽ sử dụng phương pháp này để giải quyết vấn đề nêu ra trong luận văn.

**Chương 2: Exciton – Bài toán exciton hai chiều**

Chương này tác giả giới thiệu các kiến thức cơ bản về exciton, thiết lập phương trình Schrödinger cho bài toán và đưa ra lời giải giải tích. Đây là các kiến thức nền, làm cơ sở cho phần tiếp theo.

**Chương 3: Phương Pháp Toán Tử Bài toán exciton hai chiều**

Tác giả tiến hành áp dụng OM để giải quyết bài toán exciton hai chiều. Dùng chương trình FORTRAN 77 để giải các phương trình truy toán, tìm ra một số mức năng lượng của exciton hai chiều, đồng thời khảo sát sự hội tụ tương ứng với mức năng lượng cơ bản theo giá trị  $\omega$ .

**Phần kết luận:** Việc áp dụng phép biến đổi Laplace và OM có thể giải quyết hiệu quả bài toán exciton hai chiều. Kết quả thu từ bài toán exciton hai chiều ngoài trường hợp mức năng lượng cơ bản, các trường hợp mức năng lượng kích thích hoàn toàn phù hợp với kết quả thu được từ phương pháp giải tích. Với việc khảo sát tham số  $\omega$  trong bài toán, ta đã xác định được các giá trị  $\omega$  đặc biệt trong trường hợp mức năng lượng kích thích. Hướng phát triển tiếp của đề tài là: tiếp tục khảo sát  $\omega$  để tìm ra quy luật tối ưu hóa tốc độ tính toán, sử dụng các sơ đồ khác nhau để tính toán nghiệm chính xác, chọn ra được sơ đồ tính toán phù hợp. Từ đó ứng dụng OM cho bài toán exciton âm và exciton dương trong từ trường...

## CHƯƠNG 1

# GIỚI THIỆU PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ QUA BÀI TOÁN DAO ĐỘNG TỬ PHI ĐIỀU HÒA

Trong chương này ta sẽ giới thiệu các bước cơ bản của OM thông qua ví dụ bài toán dao động tử phi điều hòa. Để minh họa những ưu điểm của phương pháp mới này ta sẽ trình bày song song với phương pháp lý thuyết nhiễu loạn [1], [4] và so sánh các kết quả bằng số của hai phương pháp.

### 1.1 Sơ đồ Rayleigh- Schrödinger cho phương pháp nhiễu loạn dừng

Xét phương trình Schrödinger dừng:

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (1.1)$$

ta tách toán tử Hamilton của bài toán thành hai thành phần:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \beta\hat{V}; \quad (1.2)$$

trong đó thành phần  $\hat{H}_0$  là toán tử Hamilton có nghiệm riêng chính xác:

$$\hat{H}_0\psi_n = \varepsilon_n\psi_n, \quad (1.3)$$

thành phần  $\hat{V}$  còn lại được gọi là thế nhiễu loạn, điều kiện áp dụng lý thuyết nhiễu loạn là thành phần nhiễu loạn  $\hat{V}$  phải “nhỏ” so với  $\hat{H}_0$ ,  $|\hat{V}| \ll |\hat{H}_0|$ , tham số nhiễu loạn  $\beta$  ( $\beta \ll 1$ ) được thêm vào để chỉ thành phần  $\hat{V}$  là nhỏ. Khi đó, nghiệm của phương trình (1.3) sẽ gần với nghiệm của phương trình (1.1). Lúc này chúng ta xem  $\varepsilon_n$  và  $\psi_n$  là nghiệm gần đúng bậc không của (1.1), các nghiệm gần đúng bậc cao hơn sẽ được tính bằng cách xét đến ảnh hưởng của  $\hat{V}$  thông qua các bổ chính năng lượng và

hàm sóng. Ở đây ta đưa vào tham số nhiễu loạn  $\beta$  để coi thành phần nhiễu loạn là nhỏ và dễ dàng nhìn thấy các bậc nhiễu loạn trong sơ đồ tính toán qua số mũ của  $\beta$ .

Ta giả thiết rằng các trị riêng của  $\hat{H}$  là không suy biến và có phổ gián đoạn, hệ hàm riêng  $\psi_n$  của  $\hat{H}_0$  là đầy đủ và trực giao ứng với năng lượng  $\varepsilon_n$ , với  $n=0,1,2,\dots$ . Khi đó, chúng ta tìm nghiệm của (1.1) dưới dạng khai triển theo các hàm riêng của  $\hat{H}_0$  như sau:

$$\Psi(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} C_k \psi_k(x).$$

Không mất tính tổng quát ta có thể giả thiết hàm sóng cho trạng thái  $n$  như sau:

$$\Psi_n(x) = \psi_n(x) + \sum_{\substack{k=0 \\ (k \neq n)}}^{+\infty} C_k \psi_k(x). \quad (1.4)$$

Thế(1.4) vào phương trình (1.1) ta có:

$$(\hat{H}_0 + \beta \hat{V}) \left( \psi_n(x) + \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k \psi_k(x) \right) = E_n \left( \psi_n(x) + \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k \psi_k(x) \right). \quad (1.5)$$

Nhân hai vế của (1.5) với  $\psi_n^*(x)$  rồi tích phân theo toàn miền biến số  $x$  ta được:

$$\psi_n^*(x)(\hat{H}_0 + \beta \hat{V}) \left( \psi_n(x) + \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k \psi_k(x) \right) = \psi_n^*(x) E_n \left( \psi_n(x) + \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k \psi_k(x) \right),$$

suy ra:

$$H_{nn} + \beta V_{nn} + \beta \sum_{k=0, (k \neq n)}^{+\infty} C_k V_{nk} = E_n. \quad (1.6)$$

Bây giờ làm tương tự như trên cho  $\psi_j^*(x)$ ,  $j \neq n$  ta được:

$$\psi_j^*(x)(\hat{H}_0 + \beta \hat{V}) \left( \psi_n(x) + \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k \psi_k(x) \right) = \psi_j^*(x) E_n \left( \psi_n(x) + \sum_{k=0, k \neq n}^{+\infty} C_k \psi_k(x) \right),$$

suy ra:



$$(E_n - H_{jj})C_j = \beta V_{jn} + \beta \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}}^{+\infty} C_k V_{jk}, \quad (j \neq n) \quad (1.7)$$

với ký hiệu các yếu tố ma trận:

$$H_{kk} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(x) \hat{H}_0 \psi_k(x) dx, \quad V_{jk} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_j^*(x) \hat{V} \psi_k(x) dx. \quad (1.8)$$

Hệ phương trình đại số (1.6) - (1.7) có thể xem tương đương với phương trình Schrödinger (1.1). Giải hệ phương trình này ta thu được năng lượng  $E_n$  và các hệ số  $C_j$ , nghĩa là tìm được hàm sóng  $\Psi_n(x)$  qua công thức (1.4). Ta có thể sử dụng lý thuyết nhiễu loạn cho hệ phương trình này bằng cách phân tích theo tham số nhiễu loạn như sau:

$$E_n = E_n^{(0)} + \sum_{s=1}^{+\infty} \beta^s \Delta E_n^{(s)}, \quad (1.9)$$

$$C_j = C_j^{(0)} + \sum_{s=1}^{+\infty} \beta^s \Delta C_j^{(s)}, \quad j \neq n. \quad (1.10)$$

Ở đây ta ký hiệu  $E_n^{(0)}, C_j^{(0)}$  là năng lượng và hệ số gần đúng bậc không, còn  $\Delta E_n^{(s)}, \Delta C_j^{(s)}, s \geq 1$  là các bổ chính vào năng lượng và hệ số hàm sóng. Dem (1.9) và (1.10) thế vào (1.7), (1.8) sau đó đồng nhất hai vế theo lũy thừa của tham số  $\beta$  ta được:

$$E_n^{(0)} = H_{nn}, \quad C_j^{(0)} = 0,$$

$$\Delta E_n^{(1)} = V_{nn}, \quad \Delta C_j^{(1)} = \frac{V_{jn}}{E_n^{(0)} - H_{jj}} \quad (j \neq n);$$

$$s \geq 2: \quad \Delta E_n^{(s)} = \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}}^{+\infty} V_{nk} \Delta C_k^{(s-1)},$$

$$\Delta C_j^{(s)} = \frac{1}{E_n^{(0)} - H_{jj}} \left( \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}}^{+\infty} V_{jk} \Delta C_k^{(s-1)} - \sum_{t=1}^{s-1} \Delta E_n^{(s-t)} \Delta C_j^{(t)} \right) \quad (j \neq n). \quad (1.11)$$

Đây là sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn mà ta sẽ sử dụng trong các phần sau.

## 1.2. Phương pháp nhiễu loạn và dao động tử phi điều hòa

Ta xét bài toán dao động phi điều hòa với toán tử Hamilton có dạng sau:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 + \lambda x^4, \quad (1.12)$$

với hệ số phi điều hòa  $\lambda > 0$ . Bài toán này có dạng chuyển động trong hồ thế và có các mức năng lượng gián đoạn.

Ta sẽ sử dụng phương pháp nhiễu loạn đã đề cập ở trên để giải quyết bài toán này.

Trước hết ta chia toán tử Hamilton thành hai phần như sau:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

với :

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2, \\ \hat{V} &= \lambda x^4. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Toán tử Hamilton gần đúng  $\hat{H}_0$  có nghiệm riêng chính xác là các hàm sóng của dao động tử điều hòa:

$$\psi_n = A_n \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) H_n(x), \quad (1.14)$$

với  $H_n(x)$  là đa thức Hermit:  $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$ .

Hàm sóng này ứng với trị riêng là năng lượng gần đúng bậc không  $\varepsilon_n = n + \frac{1}{2}$ .

Các yếu tố ma trận của các toán tử  $\hat{H}_0$  và  $\hat{V}$  ứng với các hàm số (1.14) có thể tính được như sau ( xem phụ lục 3):

$$H_{mn} = n + \frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned}
V_{n,n+4} &= \frac{\lambda}{4} \sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)}, \\
V_{n,n+2} &= \frac{\lambda}{2} (2n+3) \sqrt{(n+2)(n+1)}, \\
V_{nn} &= \frac{\lambda}{4} (6n^2 + 6n + 3).
\end{aligned} \tag{1.15}$$

Các yếu tố ma trận khác không khác thu được từ tính đối xứng:  $V_{km} = V_{mk}$ .

**Kết quả:** Trong các bảng sau chúng ta sẽ đưa ra các số liệu thu được cho trường hợp trạng thái cơ bản  $n=0$  và một trạng thái kích thích  $n=4$ . Điều kiện áp dụng lý thuyết nhiễu loạn  $\langle \psi_n | \hat{V} | \psi_n \rangle \ll \langle \psi_n | \hat{H}_0 | \psi_n \rangle$  lúc này trở thành:

$$\begin{aligned}
\frac{\lambda}{4} (6n^2 + 6n + 3) &\ll n + \frac{1}{2} \\
\rightarrow \lambda &\ll \frac{2(2n+1)}{6n^2 + 6n + 3}.
\end{aligned} \tag{1.16}$$

Với trạng thái cơ bản:  $n=0$  thì  $\rightarrow \lambda \ll 0.67$ , ta sẽ xét các trường hợp ứng với các giá trị  $\lambda = 0.01, \lambda = 0.05, \lambda = 0.1, \lambda = 0.3$  và thu được các mức năng lượng tương ứng trong bảng 1.1.

**Bảng 1:1** Trạng thái cơ bản  $n = 0$  thu được bằng lý thuyết nhiễu loạn.

	$\lambda = 0.01$	$\lambda = 0.05$	$\lambda = 0.1$	$\lambda = 0.3$
$E_0^{(0)}$	0.5000000000	0.5000000000	0.5000000000	0.5000000000
$E_0^{(1)}$	0.5075000000	0.5375000000	0.5750000000	0.7250000000
$E_0^{(2)}$	0.5072375000	0.5309375002	0.5487500013	4.8875000929
$E_0^{(3)}$	0.5072583125	0.5335390626	0.5695624993	1.0506874797
$E_0^{(4)}$	0.5072558996	0.5320310060	0.5454335949	-0.9037538228
$E_0^{(5)}$	0.5072562577	0.5331500624	0.5812433983	7.7980283886
$E_0^{(6)}$	0.5072561937	0.5321503309	0.5172605857	-38.8454419856
$E_0^{(7)}$	0.5072562070	0.5331891854	0.6502339597	251.9673269259
$E_0^{(8)}$	0.5072562038	0.5319607395	0.3357518043	-1811.3500941848
$E_0^{(9)}$	0.5072562047	0.5335887505	1.1692934364	14595.2498498883
$E_0^{(10)}$	0.5072562044	0.5311982288	-1.2786007173	-129950.4520395805

Với trạng thái kích thích:  $n = 4$  điều kiện ta thu được là  $\rightarrow \lambda \ll 0.146$ . Ta sẽ xét các trường hợp ứng với các giá trị  $\lambda = 0.01, \lambda = 0.03, \lambda = 0.06, \lambda = 0.1$ . Khi đó ta có các mức năng lượng tương ứng ở bảng 1.2.

**Bảng 1.2:** Trạng thái kích thích  $n = 4$  thu được bằng lý thuyết nhiễu loạn.

	$\lambda = 0.01$	$\lambda = 0.03$	$\lambda = 0.06$	$\lambda = 0.1$
$E_4^{(0)}$	4.5000000000	4.5000000000	4.5000000000	4.5000000000
$E_4^{(1)}$	4.8075000000	5.4225000000	6.3450000000	7.5750000000
$E_4^{(2)}$	4.7668874959	5.0569874638	4.8829498552	3.5137495980
$E_4^{(3)}$	4.7775845596	5.3458081837	7.1935156144	14.2108132978
$E_4^{(4)}$	4.7738544635	5.0436703988	2.3593110572	-23.0901477918
$E_4^{(5)}$	4.7753851516	5.4156275988	14.2619414562	129.9786587800
$E_4^{(6)}$	4.7746833968	4.9040483689	-18.4791292566	-571.7761147298
$E_4^{(7)}$	4.7750329077	5.6684285196	79.3615300321	2923.3320274444

$E_4^{(8)}$	4.7748469756	4.4448528730	-232.9328160495	-15669.8670185477
$E_4^{(9)}$	4.7749514618	6.5051300165	820.0470425212	888816.3030916408
$E_4^{(10)}$	4.7748899061	2.8703274765	-2901.9907584706	-526740.6987256789

**Nhận xét:**

Ta thấy đối với trạng thái cơ bản (bảng 1.1) trong trường hợp  $\lambda = 0.01$ , khá nhỏ so với giới hạn của điều kiện nhiễu loạn, kết quả bổ chính bậc sáu cho chính xác tới sáu chữ số sau dấu phẩy. Với trường hợp  $\lambda = 0.05$ , mặc dù vẫn nhỏ so với điều kiện nhiễu loạn xong đã thấy có dấu hiệu phân kì, chỉ còn chính xác đến hai chữ số sau dấu phẩy. Cụ thể đến giá trị  $\lambda = 0.1$  ta thấy kết quả phân kì, các bổ chính bậc ba đã cho kết quả không phù hợp, và với  $\lambda \geq 0.03$  lý thuyết nhiễu loạn không còn đúng nữa. Ta cũng nhận thấy kết quả tương tự ở trạng thái kích thích  $n = 4$  (bảng 1.2)

Như vậy khi sử dụng sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn chỉ sử dụng được một số bổ chính đầu tiên. Các bổ chính bậc cao không có ý nghĩa, bên cạnh đó tốc độ hội tụ của năng lượng không cao và chỉ áp dụng cho miền  $\lambda$  nhỏ.

1.3 Phương pháp toán tử cho bài toán dao động tử phi điều hòa

Những ý tưởng về OM đã xuất hiện vào những năm 1979. Tuy nhiên, OM được đưa ra đầu tiên vào năm 1982 bởi một nhóm các giáo sư ở trường Đại học Belarus và được ứng dụng thành công cho một nhóm rộng rãi các bài toán như các polaron, bipolaron trong trường điện từ, bài toán tương tác chùm điện tử với cấu trúc tinh thể,... trong vật lý chất rắn; bài toán tương tác hệ các boson trong lý thuyết trường. Phương pháp này được phát triển bởi Fernandez, Meson và Castro, Gerryva Silverman, Wistchel và nhiều tác giả khác [7].

Ta sẽ trình bày các điểm chính của phương pháp OM trên cơ sở ví dụ bài toán dao động tử phi điều hòa một chiều. Kết quả thu được sẽ so sánh với phương pháp nhiễu loạn ở trên.

Xét phương trình Schrödinger (1.1) cho dao động tử phi điều hòa với toán tử Hamilton không thứ nguyên (1.14). Ta sẽ giải phương trình này bằng OM với bốn bước cơ bản như sau:

**Bước một:** Chuyển toán tử Hamilton về biểu diễn của các toán tử sinh - hủy bằng cách đặt biến số động lực (tọa độ và toán tử đạo hàm) thông qua các toán tử sau:

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( \hat{x} + \frac{i}{\omega} \hat{p} \right) = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( x + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dx} \right); \\ \hat{a}^+ &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( \hat{x} - \frac{i}{\omega} \hat{p} \right) = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( x - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dx} \right).\end{aligned}\quad (1.17)$$

Ở đây toán tử  $\hat{a}$  được gọi là “toán tử hủy” và  $\hat{a}^+$  được gọi là “toán tử sinh” (xem [1],[4]);  $\omega$  là tham số thực dương được đưa thêm vào để tối ưu quá trình tính toán, ta sẽ nói rõ hơn về tham số này trong bước ba.

Ta dễ dàng thu được hệ thức giao hoán:

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \quad (1.18)$$

Hệ thức này sẽ giúp ta đưa các toán tử sinh hủy về dạng chuẩn, nghĩa là các toán tử sinh nằm ở phía bên trái và các toán tử hủy nằm về phía bên phải, thuận lợi cho các tính toán đại số sau này. Từ đây về sau ta gọi nó là dạng chuẩn (normal) của toán tử

Thế (1.17) vào (1.12) và sử dụng (1.18), ta được biểu thức dạng chuẩn của toán tử Hamilton như sau( phụ lục 1):

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1+\omega^2}{4\omega} (2\hat{a}^+ \hat{a} + 1) + \frac{1-\omega^2}{4\omega} [\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2] + \frac{3\lambda}{4\omega^4} [2(\hat{a}^+ \hat{a})^2 + 2\hat{a}^+ \hat{a} + 1] \\ &\quad + \frac{\lambda}{4\omega^2} [\hat{a}^4 + (\hat{a}^+)^4 + 4(\hat{a}^+)^3 \hat{a} + 4\hat{a}^+ \hat{a}^3 + 6(\hat{a}^+)^2 + 6\hat{a}^2].\end{aligned}\quad (1.19)$$

**Bước hai:** Tách Hamiltonian ở (1.19) thành hai thành phần như sau:

- Phần thứ nhất là  $\hat{H}_0^{OM}(\hat{a}^+ \hat{a}, \lambda, \omega)$  chỉ chứa các toán tử “trung hòa”  $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$ , nghĩa là bao gồm các toán tử có số toán tử sinh và số toán tử hủy bằng nhau:

$$\hat{H}_0^{OM} = \frac{1+\omega^2}{4\omega} (2\hat{a}^+ \hat{a} + 1) + \frac{3\lambda}{4\omega^2} [2(\hat{a}^+ \hat{a})^2 + 2\hat{a}^+ \hat{a} + 1]. \quad (1.20)$$

- Phần còn lại ta kí hiệu là  $\hat{V}^{OM}(\hat{a}^+, \hat{a}, \lambda, \omega) = \hat{H} - \hat{H}_0^{OM}(\hat{a}^+ \hat{a}, \lambda, \omega)$ .

Như vậy, tương tự như trong lý thuyết nhiễu loạn, ở đây ta tách toán tử Hamilton thành hai thành phần: thành phần  $\hat{H}_0^{OM}(\hat{a}^+\hat{a}, \lambda, \omega)$  có nghiệm chính xác mà chúng ta sẽ dễ dàng xây dựng dưới đây; riêng thành phần  $\hat{V}^{OM}(\hat{a}^+, \hat{a}, \lambda, \omega)$  được xem như thành phần “nhiễu loạn” sẽ được điều chỉnh “đủ nhỏ” để thỏa điều kiện của lý thuyết nhiễu loạn thông qua việc chọn tham số  $\omega$ .

**Bước ba:** Tìm nghiệm chính xác bậc không bằng cách giải phương trình:

$$\hat{H}_0^{OM}(\hat{a}^+\hat{a}, \lambda, \omega)|\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)}|\psi^{(0)}\rangle. \quad (1.21)$$

Ta thấy  $\hat{H}_0^{OM}(\hat{a}^+\hat{a}, \lambda, \omega)$  giao hoán với toán tử  $\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a}$  và nghiệm của nó dễ dàng xây dựng như sau [4]:

$$|n(\omega)\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle, \quad (1.22)$$

ở đây ta đã sử dụng kí hiệu Dirac để định nghĩa, khi đó nghiệm (1.22) ta gọi là vector trạng thái; và trạng thái “chân không” (Vacuum)  $|0\rangle$  được xác định bằng phương trình:

$$\hat{a}(\omega)|0\rangle = 0; \quad \langle 0|0\rangle = 0. \quad (1.23)$$

Khi cần thiết chúng ta có thể sử dụng phương trình này để xác định dạng tường minh của hàm sóng biểu diễn trạng thái chân không.

Từ các tính chất của toán tử sinh – hủy (1.18), ta dễ dàng kiểm chứng:

$$\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle; \quad (1.24)$$

điều này có nghĩa là trạng thái (1.23) là nghiệm riêng của toán tử  $\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a}$ , nghĩa là nó cũng là nghiệm riêng của toán tử  $\hat{H}_0(\hat{a}^+\hat{a}, \lambda, \omega)$ .

Ta có:

$$\begin{aligned} E_n^{(0)} &= \langle n|\hat{H}_0^{OM}|n\rangle = \langle n|\left\{\frac{1+\omega^2}{4\omega}(2\hat{a}^+\hat{a}+1) + \frac{3\lambda}{4\omega^2}\left[2(\hat{a}^+\hat{a})^2 + 2\hat{a}^+\hat{a}+1\right]\right\}|n\rangle \\ &= \frac{1+\omega^2}{4\omega}(2n+1) + \frac{3\lambda}{4\omega^2}(2n^2+2n+1), \end{aligned} \quad (1.25)$$

là năng lượng gần đúng bậc không, phụ thuộc vào tham số  $\omega$  (xem phụ lục 3). Như đã nói, đây là tham số được đưa vào để tối ưu hóa quá trình tính toán, ta xác định  $\omega$  từ điều kiện:

$$\frac{\partial E_n^{(0)}}{\partial \omega} = 0. \quad (1.26)$$

Tiêu chí để chọn giá trị  $\omega$  theo OM đã được thảo luận trong một số công trình [7] và đã chỉ ra rằng điều kiện (1.26) cho ta kết quả tương đối chính xác ở gần đúng bậc không đối với nhiều bài toán khác nhau. Điều kiện (1.26) cũng phù hợp với điều kiện  $\|\hat{H}_0\| \gg \|\hat{V}\|$ . Với bài toán chúng ta đang xét, điều kiện (1.26) dẫn tới phương trình để xác định  $\omega$  như sau:

$$(2n+1)\omega^3 - (2n+1)\omega - 6\lambda(2n^2 + 2n + 1) = 0. \quad (1.27)$$

**Bước bốn:** Phương pháp toán tử (OM) tìm nghiệm bằng số:

Đến đây chúng ta có thể sử dụng sơ đồ của lý thuyết nhiễu loạn (1.9)-(1.11) để tính các bổ chính bậc cao. Ngoài ra, do tính hội tụ của OM rất cao và chúng ta có tham số tự do  $\omega$  để điều khiển tốc độ hội tụ, ta có thể sử dụng sơ đồ vòng lặp để giải trực tiếp hệ phương trình (1.6)-(1.7).

Hàm sóng có thể viết dưới dạng chuỗi của các vector trạng thái như sau:

$$\Psi_n^{(s)} = |n\rangle + \sum_{\substack{k=0 \\ (k \neq n)}}^{n+s} C_k^{(s)} |k\rangle. \quad (1.28)$$

Thế (1.28) vào phương trình (1.1) ta có:

$$(\hat{H}_0 + \beta \hat{V}) \left( |n\rangle + \sum_{\substack{k=0 \\ (k \neq n)}}^{n+s} C_k^{(s)} |k\rangle \right) = E_n \left( |n\rangle + \sum_{\substack{k=0 \\ (k \neq n)}}^{n+s} C_k^{(s)} |k\rangle \right). \quad (1.29)$$

Nhân hai vế của (1.29) với  $\langle n|$  ta được:

$$\langle n|(\hat{H}_0 + \beta \hat{V}) \left( |n\rangle + \sum_{\substack{k=0 \\ (k \neq n)}}^{n+s} C_k^{(s)} |k\rangle \right) = \langle n|E_n \left( |n\rangle + \sum_{\substack{k=0 \\ (k \neq n)}}^{n+s} C_k^{(s)} |k\rangle \right),$$



suy ra:

$$E_n^{(s)} = H_{nn} + V_{nn} + \sum_{k=0, k \neq n}^{n+s} C_k^{(s)} V_{nk}. \quad (1.30)$$

Bây giờ làm tương tự như trên cho  $\langle j|$ ,  $j \neq n$  ta được:

$$\langle j|(\hat{H}_0 + \beta \hat{V}) \left( |n\rangle + \sum_{\substack{k=0 \\ (k \neq n)}}^{n+s} C_k^{(s)} |k\rangle \right) = \langle j|E_n \left( |n\rangle + \sum_{\substack{k=0 \\ (k \neq n)}}^{n+s} C_k^{(s)} |k\rangle \right),$$

suy ra:

$$(E_n^{(s)} - H_{jj})C_j^{(s+1)} = V_{jn} + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}}^{n+s} C_k^{(s)} V_{jk}, \quad (j \neq n) \quad (1.31)$$

Vì  $C_k^{(s)}$  và  $C_k^{(s-1)}$  cũng như  $\varepsilon_n^{(s)}$  và  $\varepsilon_n^{(s-1)}$  sai khác nhau rất ít. Nên ta có được sơ đồ vòng lặp như sau:

$$E_n^{(s)} = H_{nn} + V_{nn} + \sum_{k=0, k \neq n}^{n+s} C_k^{(s)} V_{nk},$$

$$(E_n^{(s)} - H_{jj})C_j^{(s+1)} = V_{jn} + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}}^{n+s} C_k^{(s)} V_{jk}, \quad (1.32)$$

với điều kiện ban đầu là  $C_j^{(0)} = 0$ , ( $j \neq n$ ). Chú ý rằng ở đây chúng ta không cần sử dụng tham số nhiễu loạn cho nên đã cho  $\beta = 1$ . Ngoài ra các giá trị  $E_n^{(s)}$ ,  $C_j^{(s)}$  tương ứng với các bước lặp khác nhau chứ không phải là bộ chính.

Các yếu tố ma trận trong sơ đồ trên cũng như trong sơ đồ lý thuyết nhiễu loạn được định nghĩa như (1.6), viết lại như sau:

$$H_{kk} = \langle k|\hat{H}_0^{OM}|k\rangle, \quad V_{jk} = \langle j|\hat{V}|k\rangle; \quad (1.33)$$

các phần tử ma trận này có thể tính một cách dễ dàng bằng các biến đổi thuận đại số dựa vào các tính chất (1.18), (1.23). Cụ thể là hai công thức sau :

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle; \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (1.34)$$

Việc tính các phần tử ma trận bằng các phép tính thuần đại số là một trong những ưu điểm của OM. Thật vậy, thay vì định nghĩa các phần tử ma trận như (1.6) và tính các tích phân tương ứng với các hàm sóng ở dạng tường minh, ở đây ta chỉ dựa vào các biến đổi đại số nhờ các hệ thức (1.18) và (1.23) và cụ thể là sử dụng (1.26) và (1.34).

Kết quả ta có các phần tử ma trận khác không như sau (xem phụ lục 3):

$$\begin{aligned} H_{nn} &= (H_0)_{nn} = \langle n | \frac{1+\omega^2}{4\omega} (2\hat{a}^+ \hat{a} + 1) + \frac{3\lambda}{4\omega^2} [2(\hat{a}^+ \hat{a})^2 + 2\hat{a}^+ \hat{a} + 1] | n \rangle \\ &= \frac{1+\omega^2}{4\omega} (2n+1) + \frac{3\lambda}{4\omega^2} (2n^2 + 2n + 1), \\ V_{n,n+2} &= \langle n | \frac{1-\omega^2}{4\omega} \hat{a}^2 + \frac{\lambda}{4\omega^2} (4\hat{a}^+ \hat{a}^3 + 6\hat{a}^2) | n+2 \rangle \\ &= \left[ \frac{1-\omega^2}{4\omega} + \frac{\lambda}{4\omega^2} (4n+6) \right] \sqrt{(n+2)(n+1)} = \left[ \frac{1-\omega^2}{4\omega} + \frac{\lambda}{2\omega^2} (2n+3) \right] \sqrt{\frac{(n+2)!}{n!}} \\ &= \left[ \frac{1-\omega^2}{4\omega} + \frac{\lambda}{2\omega^2} (2n+3) \right] \sqrt{(n+2)(n+1)}, \\ V_{n,n+4} &= \langle n | \frac{\lambda}{4\omega^2} \hat{a}^4 | n+4 \rangle = \frac{\lambda}{4\omega^2} \sqrt{\frac{(n+4)!}{n!}} = \frac{\lambda}{4\omega^2} \sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)}; \end{aligned} \quad (1.35)$$

các phần tử ma trận khác thu được dựa vào tính đối xứng  $V_{nm} = V_{mn}$ .

**Bảng 1.3:** Năng lượng trạng thái cơ bản  $n = 0$  thu được bằng OM.

	$\lambda = 0.01$	$\lambda = 0.05$	$\lambda = 0.1$	$\lambda = 0.3$	$\lambda = 1.5$
$E_0^{(0)}$	0.5072875410	0.5477040816	0.5749999999	0.6689058171	0.9727107180
$E_0^{(1)}$	0.5072875410	0.5477040816	0.5749999999	0.6689058171	0.9727107180
$E_0^{(2)}$	0.5072563014	0.5323777399	0.558838596	0.6373408787	0.8817884333
$E_0^{(3)}$	0.5072562707	0.5326638127	0.559112766	0.6378326682	0.8840817664
$E_0^{(4)}$	0.5072562023	0.5326424521	0.559151382	0.6380153133	0.8849480705
$E_0^{(5)}$	0.5072620492	0.5326424823	0.559146495	0.6379948737	0.8848112845
$E_0^{(6)}$	0.5072620448	0.5326427790	0.559146278	0.6379914404	0.8847892918
$E_0^{(7)}$	0.5072620453	0.5326427553	0.559146329	0.6379917786	0.8847943659
$E_0^{(8)}$	0.5072620452	0.5326427551	0.559146328	0.6379918013	0.8847946861
$E_0^{(9)}$	0.5072620452	0.5326427553	0.559146327	0.6379917866	0.8847944336
$E_0^{(10)}$	0.5072620452	0.5326427552	0.559146327	0.6379917844	0.8847944198
$E_0^{(T)}$	<b>0.5072620452</b>	<b>0.5326427552</b>	<b>0.559146327</b>	<b>0.6379917842</b>	<b>0.8847944251</b>

**Bảng 1.4:** Năng lượng trạng thái kích thích  $n = 4$  thu được bằng OM

	$\lambda = 0.01$	$\lambda = 0.03$	$\lambda = 0.06$	$\lambda = 0.1$	$\lambda = 1.5$
$E_4^{(0)}$	4.8092999999	5.2078603252	5.8694444444	6.2490740740	12.4453125000
$E_4^{(1)}$	4.8092999999	5.2078603252	5.8694444444	6.2490740740	12.4453125000
$E_4^{(2)}$	4.7736995554	5.2060800093	5.6861199877	6.2223820797	12.3776059956
$E_4^{(3)}$	4.7747285026	5.2051664217	5.6967910549	6.2199718947	12.3574329062
$E_4^{(4)}$	4.7749316376	5.2051386595	5.7021291564	6.2202679913	12.3556586805
$E_4^{(5)}$	4.7749139015	5.2051516636	5.7011304336	6.2203200633	12.3576222919
$E_4^{(6)}$	4.7749129456	5.2051514395	5.7009480693	6.2203017742	12.3577769104
$E_4^{(7)}$	4.7749131151	5.2051511291	5.7010151586	6.2202996521	12.3574810758
$E_4^{(8)}$	4.7749131114	5.2051511437	5.7010178067	6.2203009392	12.3574842521
$E_4^{(9)}$	4.7749131114	5.2051511499	5.7010146470	6.2203009652	12.3575265919
$E_4^{(10)}$	4.7749131115	5.2051511492	5.7010148920	6.2203008706	12.3575216732
$E_4^{(T)}$	<b>4.7749131114</b>	<b>5.2051511491</b>	<b>5.7010149485</b>	<b>6.2203008813</b>	<b>12.3575176582</b>

Ta thấy khi sử dụng OM, với trường hợp mức năng lượng cơ bản  $n=0$  (bảng 1.3) và trường hợp kích thích ứng với  $n = 4$  (bảng 1.4) ứng với các giá trị  $\lambda$  khác nhau, sau bỏ chính bậc sáu cũng có kết quả chính xác tới sáu chữ số sau dấu phẩy.

Ta có thể thấy tính hiệu quả của OM so với phương pháp nhiễu loạn đã thu được ở bảng 1.1 và bảng 1.2 bằng việc xét thêm trường hợp  $\lambda = 1.5$  đối với hai trường hợp  $n = 0$  và  $n = 4$ . Ta thấy kết quả vẫn hội tụ như các trường hợp  $\lambda$  có giá trị nhỏ.

Như vậy OM cho phép tìm giá trị năng lượng ứng với các giá trị tham số nhiễu loạn  $\lambda$  khác nhau. Các bỏ chính bậc cao hội tụ tốt.

## CHƯƠNG 2

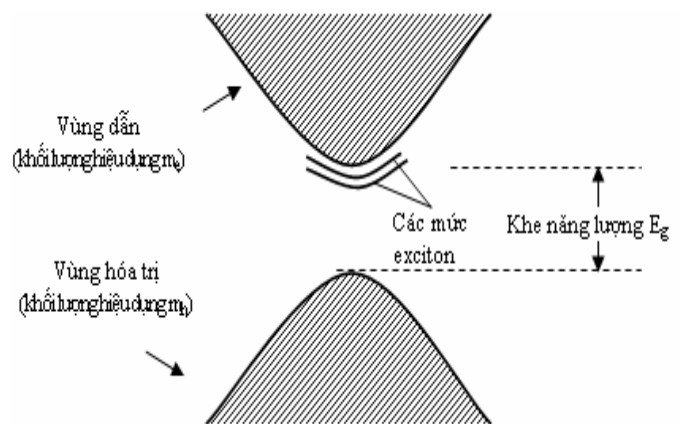
### EXCITON – BÀI TOÁN EXCITON HAI CHIỀU

Trong chương này tác giả giới thiệu các kiến thức cơ bản về exciton như khái niệm, phân loại, tính chất. Sau đó thiết lập phương trình Schrödinger cho bài toán và đưa ra lời giải giải tích làm cơ sở để so sánh với kết quả thu được bằng OM ở chương sau.

#### 2.1 Exciton

##### 2.1.1 Khái niệm

Trong chất bán dẫn thông thường, độ sai khác năng lượng  $E_g$  giữa dải dẫn và dải hóa trị ở khoảng năng lượng kéo dài từ vùng hồng ngoại tới vùng ánh sáng khả kiến. Một photon năng lượng  $h\omega > E_g$  có thể kích thích một điện tử trong dải hóa trị nhảy lên dải dẫn và để lại trong dải hóa trị một lỗ trống thể hiện như một điện tích dương. Một điện tử liên kết với một lỗ trống bởi tương tác Coulomb sẽ cho ra một hệ tương tự như nguyên tử hydro. Ở giới hạn mật độ thấp, khi đó ta bỏ qua hiệu ứng nhiễu hạt, cặp điện tử - lỗ trống được coi như một giả hạt tự do gọi là exciton.



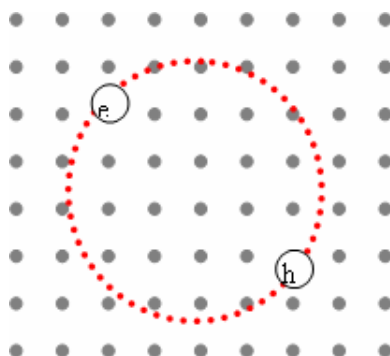
Hình 2.1- Các mức năng lượng của exciton [7]

##### 2.1.2 Phân loại

Exciton được phân làm hai loại tùy thuộc vào tính chất và vật liệu đang xét:

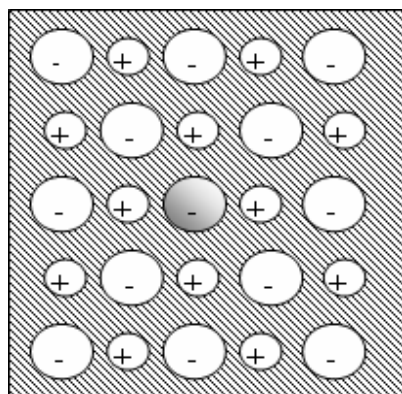
- Trong chất bán dẫn: điện tử và lỗ trống tương tác với nhau ở khoảng cách lớn hơn nhiều lần hằng số mạng, cộng thêm thế màn chắn (thế tương tác) của môi trường mạng nên năng lượng liên kết của exciton thường nhỏ hơn nhiều so với năng lượng của

hydro, loại này gọi là exciton Mott-Wannier ( hình 2.2), thường xảy ra trong tinh thể đồng hóa trị.



Hình 2.2 - Exciton Mott Wannier [7]

- Trong chất cách điện: hằng số điện môi lớn nên điện tử và lỗ trống tương tác với nhau ở khoảng cách phân tử, loại exciton này được gọi là exciton Frenkel (hình 2.3), do kích thước nhỏ nên tương tác Coulomb lớn ít ảnh hưởng trường mạng (tinh thể) nên năng lượng liên kết của nó lớn (cỡ 1,5eV)



Hình 2.3 – Exciton Frenkel [7]

### 2.1.3 Tính chất của exciton

Exciton có các tính chất chính như sau:

- Chỉ có mặt trong bán dẫn hoặc điện môi.
- Về mặt cấu trúc exciton trung hòa giống như nguyên tử Hydro, tuy nhiên nó có bán kính lớn hơn và năng lượng liên kết nhỏ hơn. Tương tự, các exciton dương hay âm cho ta hình ảnh ion phân tử  $H_2^+$  hay nguyên tử He.

- Việc tạo ra các mức exciton trong vùng cấm (exciton Mott-Wannier) rất giống với việc tạo ra các mức tạp trong bán dẫn. Ở mức cơ bản năng lượng liên kết exciton trùng với mức năng lượng tạp chất donor nhóm V hoặc các bán dẫn nguyên tố nhóm IV như Si, Ge (cỡ 0.005eV).

- Không phải chỉ có một mức exciton mà có cả một dải các mức exciton gián đoạn. Phổ hấp thụ exciton là phổ gián đoạn, gồm một dải các vạch như phổ hấp thụ của hydro.

- Sự tồn tại của exciton được chứng tỏ trong thực nghiệm qua việc phát hiện một vùng phổ hấp thụ gần bờ hấp thụ cơ bản về phía bước sóng dài với các mũi nhọn (peak) hấp thụ (ở nhiệt độ thấp) mà không làm thay đổi nồng độ hạt dẫn. Phổ vạch dạng giống như nguyên tử Hydro đã được phát hiện trong các bán dẫn có vùng cấm rộng như CdS,  $\text{HgI}_2$ ,  $\text{PbI}_2$ ,  $\text{CdI}_2$ ,  $\text{CuO}_2$ ,...[7].

## 2.2 Bài toán exciton hai chiều

### 2.2.1 Phương trình Schrödinger cho exciton hai chiều

Theo cơ học cổ điển, năng lượng của hệ gồm electron và lỗ trống tương tác

$$E = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + U(r), \quad (2.1)$$

trong đó

- +  $r$  là khoảng cách giữa hai hạt.
- +  $p_1$  là xung lượng của lỗ trống (h).
- +  $p_2$  là xung lượng của electron (e).
- +  $U(r)$  là thế tương tác e-h.

Một cách tương ứng Hamiltonian của hệ bằng:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + U(r). \quad (2.2)$$

Viết lại (2.2) trong hệ tọa độ chuyển động khối tâm và chuyển động tương đối của hai hạt (xem phụ lục 4):

$$\hat{H} = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{\hbar^2}{2(m_2 + m_1)} \nabla_G^2 \right) \Psi + U(r). \quad (2.3)$$

Trong đó:

+  $\nabla_r$  xung lượng ứng với chuyển động tương đối của hai hạt

+  $\nabla_G$  là xung lượng của chuyển động khối tâm.

Tách  $\hat{H}$  thành hai thành phần:

$$\hat{H} = \hat{H}_G + \hat{H}_r, \quad (2.4)$$

trong đó:

$$+ \hat{H}_G = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \nabla_G^2 : \text{chuyển động khối tâm của hệ có khối lượng } m = m_1 + m_2,$$

$$+ \hat{H}_r = \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + U(r) : \text{chuyển động tương đối của hạt trong trường thế Coulomb}$$

với khối lượng rút gọn  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ .

Khi đó phương trình Schrödinger có dạng:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2(m_2 + m_1)} \nabla_G^2 \right) \Psi - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \Psi - U(r) \Psi = E \Psi, \quad (2.5)$$

Dễ nhận thấy  $[\hat{H}_G, \hat{H}_r] = 0$ , do đó  $\hat{H}_G, \hat{H}_r$  giao hoán với  $\hat{H}$ , khi đó phương trình trị riêng được tách thành hai phương trình trị riêng của  $\hat{H}_G, \hat{H}_r$ .

$$\left\{ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + U(r) \right\} \psi_r(r) = E_r \psi_r(r) \right. \quad (2.6)$$

$$\left. \left\{ -\frac{\hbar^2}{2(m_2 + m_1)} \nabla_G^2 \psi_G(R) = E_G \psi_G(R) \right\} \right. \quad (2.7)$$

Khi đó:

$$E = E_r + E_G,$$

$$\Psi = \psi_r(r) \cdot \psi_G(R).$$



Phương trình (2.7) là phương trình Schrödinger của hạt tự do có  $m=m_1+m_2$ , ta có thể dễ dàng tìm được năng lượng và hàm sóng của nó như sau [5]:

$$E_G = \frac{2\pi^2\hbar^2}{L^2(m_1+m_2)}n_r^2,$$

$$\psi_G(r) = \frac{1}{(2\pi)}e^{ikr}. \quad (2.8)$$

Như vậy, ta chỉ cần xác định nghiệm của phương trình chuyển động tương đối (2.6). viết dưới dạng không thứ nguyên sau ( xem phụ lục 4):

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{Z}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right\} \psi = E\psi \quad (2.9)$$

với  $U(x, y) = \frac{Z}{\sqrt{x^2 + y^2}}$  là thế Coulomb.

### 2.2.2 Phương pháp giải tích cho bài toán exciton hai chiều.

Trong phần này ta sẽ tiến hành giải (2.9) theo phương pháp giải tích để đối chiếu với phương pháp toán tử ở phần sau.

#### \* Phương trình Schrödinger của exciton hai chiều trong tọa độ cực:

Chuyển toán tử Hamiton trong phương trình (2.9) qua biểu diễn trong tọa độ cực ta được

$$\hat{H} = -\frac{1}{2r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{2r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{Z}{r}. \quad (2.10)$$

Với toán tử có dạng như trên, khi thay vào phương trình Schrödinger để tìm nghiệm sẽ khó vì trong phương trình chứa hai biến số. Ta sẽ sử dụng một nguyên lý trong cơ học lượng tử: “Nếu hai toán tử giao hoán với nhau thì chúng có chung hệ hàm riêng”, vì vậy ta đi tìm các toán tử giao hoán với toán tử  $\hat{H}$ , ta biết đối với bài toán hệ nguyên tử hai chiều hình chiếu moment xung lượng trên Oz bảo toàn. Thực vậy ta có:

$$\hat{L}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad (2.11)$$

Thay vào (2.10) ta được:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}_z^2}{2r^2} - \frac{Z}{r}. \quad (2.12)$$

Dựa vào biểu thức toán tử này, ta thấy hai toán tử  $\hat{H}$  và  $\hat{L}_z$  giao hoán với nhau vì  $\hat{L}_z$  giao hoán với hàm vô hướng  $U(r) = -\frac{Z}{r}$  và chính nó, và  $\hat{L}_z$  chỉ phụ thuộc vào biến số góc nên giao hoán với thành phần phụ thuộc vào  $r$  của  $\hat{H}$ . Như vậy hai toán tử  $\hat{H}$  và  $\hat{L}_z$  có chung hệ hàm riêng. Do đó để tìm hệ hàm riêng của toán tử  $\hat{H}$  phụ thuộc theo hai biến số không gian, ta cần lần lượt tìm hàm riêng của  $\hat{L}_z$  phụ thuộc theo biến số  $\varphi$ , và cuối cùng thay vào trong phương trình Schrödinger tìm hàm sóng của electron phụ thuộc theo hai biến số  $r$  và  $\varphi$ .

Phương trình hàm riêng- trị riêng của toán tử  $\hat{L}_z$  là ( xem phụ lục 5):

$$\hat{L}_z u(\varphi) = m u(\varphi), \quad (2.13)$$

trong đó  $u(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$  và  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

#### \* Năng lượng – hàm sóng của exciton hai chiều

Phương trình Schrödinger:

$$\hat{H}\Psi(r, \varphi) = E\Psi(r, \varphi),$$

hay:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}_z^2}{r^2} \right] - \frac{Z}{r} \right\} \Psi(r, \varphi) = E\Psi(r, \varphi). \quad (2.14)$$

Tìm nghiệm của phương trình (2.14) dưới dạng:

$$\Psi(r, \varphi) = R(r)u(\varphi). \quad (2.15)$$

trong đó  $u(\varphi)$  phụ thuộc vào biến số  $\varphi$ ,  $R(r)$  phụ thuộc vào biến số  $r$ .

Thay (2.13) vào (2.14), sau khi đơn giản số hạng  $u(\varphi)$  ta được:

$$-\frac{1}{2}\left[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)-\frac{m^2}{r^2}\right]R(r)-\frac{Z}{r}R(r)=ER(r),$$

hay:

$$-\frac{1}{2}\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{m^2-1/4}{r^2}\right](r^{1/2}R)-\frac{Z}{r}(r^{1/2}R)=E(r^{1/2}R). \quad (2.16)$$

Ta sẽ rút ra nghiệm của phương trình (2.16) bằng phép khai triển chuỗi.

Trước hết với  $r \rightarrow \infty$  ta có thể bỏ qua các số hạng vô cùng bé bậc cao hơn  $(\frac{1}{r}; \frac{1}{r^2})$  trong phương trình trên.

$$\frac{d^2}{dr^2}(r^{1/2}R)+2E(r^{1/2}R)=0, \quad (2.17)$$

đặt  $2E = -\alpha^2$  do năng lượng  $E < 0$ .

Khi đó ta có dạng nghiệm ở trạng thái liên kết là:

$$r^{1/2}R \sim e^{-r\alpha}G(r). \quad (2.18)$$

Thay vào trong phương trình trên ta thu được:

$$\frac{d^2}{dr^2}G-2\alpha\frac{dG}{dr}-\frac{m^2-1/4}{r^2}G+\frac{2Z}{r}G=0, \quad (2.19)$$

Ta giải (2.19) bằng cách đặt  $G(r)$  dưới dạng chuỗi lũy thừa của  $r$ :

$$G(r)=r^S H(r). \quad (2.20)$$

Sau khi thay (2.20) vào (2.19) ta thu được phương trình đối với  $H$ :

$$r^2\frac{d^2H}{dr^2}+(-2\alpha r^2+2Sr)\frac{dH}{dr}+\left[2\alpha Sr+2Zr-m^2+\frac{1}{4}+S(S-1)\right]H=0. \quad (2.21)$$

Nếu đặt  $r=0$  ta có:

$$m^2-\frac{1}{4}=S(S-1)\rightarrow|m|+\frac{1}{2}=S. \quad (2.22)$$

Thay (2.14) vào (2.13) ta thu được:

$$r^2 \frac{d^2}{dr^2} H + \left( -2\alpha r^2 + 2 \left( |m| + \frac{1}{2} \right) r \right) \frac{dH}{dr} + \left[ 2\alpha \left( |m| + \frac{1}{2} \right) r + 2Zr \right] H = 0,$$

hay:

$$\frac{d^2 H}{dr^2} + \left( -2\alpha + \frac{2}{r} \left( |m| + \frac{1}{2} \right) \right) \frac{dH}{dr} + \left[ \frac{2\alpha}{r} \left( |m| + \frac{1}{2} \right) + \frac{2Z}{r} \right] H = 0. \quad (2.23)$$

Thay  $H(r) = \sum_k a_k r^k$  vào (2.23) ta được:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[ (k+1) \left( 2k + 2\alpha \left( |m| + \frac{1}{2} \right) \right) a_{k+1} + \left( 2Z - 2\alpha \left( |m| + \frac{1}{2} \right) - 2\alpha k \right) a_k \right] r^k = 0.$$

Suy ra:

$$2Z - 2\alpha \left( |m| + \frac{1}{2} \right) - 2\alpha k = 0.$$

Ta tính được:

$$\rightarrow \alpha = \frac{Z}{|m| + k + \frac{1}{2}},$$

hay

$$\rightarrow E = -\frac{Z^2}{2 \left( |m| + k + \frac{1}{2} \right)^2}; \text{ với } k = 0, 1, 2, \dots$$

Đặt:  $n = k + |m| + 1$ , ta thu được biểu thức tính năng lượng:

$$\rightarrow E = -\frac{Z^2}{2 \left( n - \frac{1}{2} \right)^2} \text{ với } n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.24)$$

$n$  là số lượng tử chính của năng lượng

Khi đó hàm bán kính có dạng:

$$r^{1/2} R = A. r^{|m|+1/2}. F(-k; 2|m| - 1; 2\alpha), \quad (2.25)$$

trong đó  $F(-k; 2|m| - 1; 2\alpha)$  hàm siêu bội [7]:

Từ (2.25) suy ra:

$$R(r) = A.r^{|m|}.F(-k; 2|m| - 1; 2\alpha). \quad (2.26)$$

Hàm sóng có dạng như sau:

$$\Psi(r, \varphi) = R(r)u(\varphi) = A.e^{im\varphi}r^{|m|}.F(-k; 2|m| - 1; 2\alpha). \quad (2.27)$$

## CHƯƠNG 3

# PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ CHO BÀI TOÁN EXCITON HAI CHIỀU

Trong chương này tác giả áp dụng OM để giải bài toán exciton hai chiều bằng cách sử dụng phép biến đổi Laplace, tìm ra nghiệm số cho bài toán, so sánh với kết quả thu được bằng lời giải giải tích. Sau đó, khảo sát tính hội tụ của bài toán khi giải bằng OM cho trường hợp năng lượng cơ bản theo tham số  $\omega$ .

### 3.1 Phương trình Schrödinger cho exciton hai chiều biểu diễn qua toán tử sinh hủy

Phương trình Schrödinger:

$$\hat{H} \Psi_n(x, y) = \varepsilon_n \Psi_n(x, y), \quad (3.1)$$

với

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{Z}{r}. \quad (3.2)$$

Trong biểu thức (3.2) có số hạng chứa biến động lực ở mẫu số sẽ gây khó khăn khi sử dụng OM. Để loại trừ khó khăn đó ta sử dụng phép biến đổi Laplace như sau:

$$\hat{U}_1 = \frac{1}{r} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-tr^2}}{\sqrt{t}} dt, \quad (3.3)$$

từ đó thu được Hamiltonian dưới dạng:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{Z}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-t(x^2+y^2)}}{\sqrt{t}} dt. \quad (3.4)$$

### 3.2 Phương pháp toán tử giải bài toán exciton hai chiều

Ta sẽ giải phương trình Schrödinger (2.9) bằng OM với bốn bước cơ bản như sau:

**Bước một:** Chuyển toán tử Hamilton về biểu diễn của các toán tử sinh - hủy hai chiều bằng cách đặt biến số động lực (tọa độ và toán tử đạo hàm) thông qua các toán tử sau (xem phụ lục 6):

$$\begin{aligned}\hat{a}(\omega_x) &= \sqrt{\frac{\omega_x}{2}} \left( x + \frac{1}{\omega_x} \frac{\partial}{\partial x} \right), & \hat{a}^+(\omega_x) &= \sqrt{\frac{\omega_x}{2}} \left( x - \frac{1}{\omega_x} \frac{\partial}{\partial x} \right), \\ \hat{b}(\omega_y) &= \sqrt{\frac{\omega_y}{2}} \left( y + \frac{1}{\omega_y} \frac{\partial}{\partial y} \right), & \hat{b}^+(\omega_y) &= \sqrt{\frac{\omega_y}{2}} \left( y - \frac{1}{\omega_y} \frac{\partial}{\partial y} \right);\end{aligned}\quad (3.5)$$

ở đây các toán tử  $\hat{a}, \hat{b}$  được gọi là “toán tử hủy” và  $\hat{a}^+, \hat{b}^+$  được gọi là “toán tử sinh” [4];  $\omega_x, \omega_y$  là các tham số thực dương được đưa thêm vào để tối ưu quá trình tính toán, ta sẽ nói rõ hơn về các tham số này trong bước ba.

Để dàng kiểm chứng các toán tử sinh hủy (3.5) thỏa mãn hệ thức giao hoán:

$$\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1, \quad \hat{b}\hat{b}^+ - \hat{b}^+\hat{b} = 1; \quad (3.6)$$

các giao hoán tử khác bằng không. Hệ thức này sẽ giúp ta đưa các toán tử sinh hủy về dạng chuẩn, nghĩa là các toán tử sinh nằm ở phía bên trái và các toán tử hủy nằm về phía bên phải, thuận lợi cho các tính toán đại số sau này.

Mặt khác, để thuận tiện trong tính toán ta sử dụng các toán tử:

$$\hat{N} = 2(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b} + 1), \quad \hat{M} = \hat{a}^2 + \hat{b}^2, \quad \hat{M}^+ = (\hat{a}^+)^2 + (\hat{b}^+)^2, \quad (3.7)$$

trong đó ba toán tử  $\hat{N}, \hat{M}, \hat{M}^+$  tạo thành một đại số kín, thỏa mãn các hệ thức giao hoán ( xem phụ lục 6):

$$[\hat{M}, \hat{M}^+] = 2\hat{N}, \quad [\hat{M}, \hat{N}] = 4\hat{M}, \quad [\hat{N}, \hat{M}^+] = 4\hat{M}^+, \quad (3.8)$$

đồng thời do tính đối xứng nên ta chọn  $\omega_x = \omega_y = \omega$ , từ đó ta viết lại Hamiltonian (3.4) như sau:

$$\hat{H} = -\frac{\omega}{4}(\hat{M} + \hat{M}^+ - \hat{N}) - Z \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \exp\left[-\tau(\hat{M}^+ + \hat{N} + \hat{M})\right]. \quad (3.9)$$

Thành phần có dạng hàm mũ  $\hat{S}(\tau) = \exp\left[-\tau(\hat{N} + \hat{M} + \hat{M}^+)\right]$  có thể đưa về dạng chuẩn như sau:

$$\hat{S}(\tau) = \exp\left(-\frac{\tau}{2\tau+1}\hat{M}^+\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\ln|2\tau+1|(\hat{N})\right) \exp\left(-\frac{\tau}{2\tau+1}\hat{M}\right),$$

điều này cho phép ta dễ dàng sử dụng tính toán đại số dựa vào các tính chất (3.6) và (3.8) (xem phụ lục 7).

**Bước hai:** Tách Hamiltonian ở phương trình (3.9) thành hai thành phần như sau:

Phần thứ nhất là  $\hat{H}_0(\hat{a}^+\hat{a}, \hat{b}^+\hat{b}, \omega)$  chỉ chứa các số hạng giao hoán với các toán tử  $\hat{a}^+\hat{a}$  và  $\hat{b}^+\hat{b}$ , chứa các toán tử “trung hòa”:

$$\hat{H}_0 = \frac{\omega}{4} \hat{N} - Z \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{(i!)^2} \left( \frac{\tau}{1+2\tau} \right)^{2i} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2\tau)^{\hat{N}/2}} \hat{M}^i, \quad (3.10)$$

ở đây ta khai triển toán tử  $\hat{S}$  theo chuỗi Taylor để tách các thành phần trung hòa.

Còn  $\hat{V} = \hat{H} - \hat{H}_0$  có thể xem như thành phần “nhiều loạn”. Nghiệm gần đúng bậc không của phương trình Schrödinger chính là nghiệm riêng chính xác của toán tử  $\hat{H}_0$ , còn các bổ chính bậc cao hơn ta có thể tính toán theo sơ đồ thích hợp.

**Bước ba:** Tìm nghiệm chính xác bậc không bằng cách giải phương trình:

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = \varepsilon_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle. \quad (3.11)$$

Trước hết ta chọn bộ hàm sóng cơ sở cho bài toán theo bộ hàm cơ sở của dao động tử điều hoà:

$$|n_x, n_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y!}} (\hat{a}^+)^{n_x} (\hat{b}^+)^{n_y} |0(\omega)\rangle.$$

Như đã nói, hàm riêng của toán tử Hamilton cũng đồng thời là nghiệm riêng của toán tử  $\hat{L}_z$  và toán tử  $\hat{M}^+$ , ta viết lại bộ hàm cơ sở cho exciton hai chiều theo trị riêng  $m$  của toán tử  $\hat{L}_z$  (xem phụ lục 9):

$$|k(m)\rangle = C_{km} [(\hat{a}^+)^2 + (\hat{b}^+)^2]^k (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0(\omega)\rangle. \quad (3.12)$$



với:

$$|k(m)\rangle = \begin{cases} C_{km} [(\hat{a}^+)^2 + (\hat{b}^+)^2]^k (\hat{a}^+ + i\hat{b}^+)^{|m|} |0(\omega)\rangle & \text{khi } m > 0 \\ C_{km} [(\hat{a}^+)^2 + (\hat{b}^+)^2]^k (\hat{a}^+ - i\hat{b}^+)^{|m|} |0(\omega)\rangle & \text{khi } m < 0 \end{cases}$$

với  $k = 0, 1, 2, 3, \dots$ ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  và  $|0(\omega)\rangle$  là trạng thái chân không được định nghĩa:

$$\hat{a}|0(\omega)\rangle = 0, \quad \hat{b}|0(\omega)\rangle = 0; \quad (3.13)$$

và điều kiện chuẩn hóa là  $\langle 0(\omega)|0(\omega)\rangle = 1$ , cho phép ta tìm được hàm sóng đã chuẩn hóa (xem phụ lục 9):

$$|k(m)\rangle = \frac{1}{2^k \sqrt{2^{|m|} k! (|m| + k)!}} [(\hat{a}^+)^2 + (\hat{b}^+)^2]^k (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0(\omega)\rangle, \quad (3.14)$$

với  $k = 0, 1, 2, \dots$ ;  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ .

Với hàm sóng như trên, ta có các biểu thức thường dùng ( xem phụ lục 9):

$$\begin{aligned} \hat{N}|k, m\rangle &= 2(2k + |m| + 1)|k, m\rangle; \\ \hat{M}|k, m\rangle &= 2\sqrt{k(k + |m|)}|k - 1, |m|\rangle; \\ \hat{M}^+|k, m\rangle &= 2\sqrt{(k + 1)(k + |m| + 1)}|k + 1, m\rangle, \end{aligned} \quad (3.15)$$

giúp ta xác định được nghiệm của phương trình (3.11):

$$\varepsilon_k^{(0)} = H_{kk} = \frac{\omega}{2}(2k + |m| + 1) - Z\sqrt{\omega} \sum_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} \frac{(k)! (k + |m|)!}{(k - i)! (k + |m| - i)!} I_{2k + |m| + 1}^{2i}, \quad (3.16)$$

$$\text{với } I_p^q = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} dt \frac{(-t^2)^q}{(1 + t^2)^p} = \frac{\sqrt{\pi} (-1)^q (2p - 2q - 3)!! (2q - 1)!!}{2^{p-1} (p - 1)!}, \text{ với } p, q = 1, 2, 3, \dots$$

$\left( \begin{smallmatrix} p > q \geq 0 \\ p, q \in \mathbb{Z} \end{smallmatrix} \right)$

(xem phụ lục 11).

Biểu thức trên chính là năng lượng gần đúng bậc không tìm được phụ thuộc vào tham số  $\omega$ . Như đã nói, đây là tham số được đưa vào để tối ưu hóa quá trình tính toán, ta xác định  $\omega$  từ điều kiện (1.26) như sau:

$$\omega = \left[ \frac{Z}{(2k + |m| + 1)} \sum_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} \frac{(k)!}{(k-i)!} \frac{(|m| + k)!}{(|m| + k - i)!} I_{2k+|m|+1}^{2i} \right]^2. \quad (3.17)$$

Tuy nhiên việc chọn  $\omega$  theo điều kiện này cho tốc độ hội tụ chưa cao, việc chọn  $\omega$  để tăng tốc độ hội tụ sẽ khảo sát thêm ở phần sau.

**Bước bốn:** Phương pháp toán tử (OM) tìm nghiệm bằng số:

Vì các vector trạng thái (3.12) tạo thành một bộ cơ sở đầy đủ nên lời giải chính xác của hàm sóng có thể viết dưới dạng chuỗi của các vector trạng thái đó như sau:

$$|\Psi_{km}\rangle = |k(m)\rangle + \sum_{\substack{l=0 \\ l \neq k}}^{\infty} C_l |l(m)\rangle, \quad (3.18)$$

Trong phần này, ta sẽ sử dụng sơ đồ vòng lặp đã đề cập ở mục 1.3 để tìm nghiệm số chính xác. Khi đó hàm sóng chính xác ở bậc (s) ứng với năng lượng  $E_{km}^{(s)}$  có dạng:

$$|\Psi_{km}\rangle^{(s)} = |k(m)\rangle + \sum_{\substack{l=0 \\ l \neq k}}^{k+s} C_l |l(m)\rangle, \quad (3.19)$$

Hệ phương trình truy toán để xác định năng lượng chính xác ở gần đúng bậc s là:

$$H_{kk} + \sum_{\substack{l=0 \\ l \neq k}}^{k+s} C_l^{(s)} H_{lk} = \varepsilon_{km}^{(s)}, \quad (3.20)$$

$$C_j^{(s)} = \frac{H_{jk} + \sum_{\substack{l=0 \\ l \neq k, j}}^{k+s} C_l^{(s-1)} H_{jl}}{\varepsilon_k^{(s-1)} - H_{jj}}, \quad (j \neq k), \quad (3.21)$$

với điều kiện ban đầu là  $C_k^{(0)} = 0$ ,  $\varepsilon_{km}^{(0)} = H_{kk}$ .

Các yếu tố ma trận trong sơ đồ trên có thể tính một cách dễ dàng bằng các biến đổi thuận đại số nhờ các hệ thức (3.8), (3.13). Kết quả ta có các phần tử ma trận khác không như sau (xem phụ lục 10):

$$H_{k,k} = \frac{\omega}{2} (2k + |m| + 1) - Z\sqrt{\omega} \sum_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} \frac{(k)! (k + |m|)!}{(k-i)! (k + |m| - i)!} I_{2k+|m|+1}^{2i},$$

$$\begin{aligned}
 H_{k,k+s} &= \langle k(m) | \hat{V} | k+s(m) \rangle, \\
 H_{k,k+1} &= -\frac{\omega}{2} \sqrt{(k+1)(k+|m|+1)} - Z\sqrt{\omega} \sum_{i=1}^{k+1} \frac{1}{i!(i-1)!} \frac{\sqrt{(k)!(k+|m|)!(k+1)!(k+|m|+1)!}}{(k+1-i)!(k+|m|+1-i)!} I_{2k+|m|+2}^{2i-1} \\
 H_{k,k+s}^{(s>1)} &= -Z\sqrt{\omega} \sum_{i=s}^{k+s} \frac{1}{i!(i-s)!} \frac{\sqrt{(k)!(k+|m|)!(k+s)!(k+|m|+s)!}}{(k+s-i)!(k+|m|+s-i)!} I_{2k+|m|+s+1}^{2i-s} \quad (3.22)
 \end{aligned}$$

các phần tử ma trận khác thu được dựa vào tính đối xứng  $H_{kl} = H_{lk}$ .

### Kết quả:

Năng lượng cơ bản (trạng thái 1s) tính theo lời giải giải tích :  $E_1^{(0)} = -2.000000000$

**Bảng 3.1:** Kết quả năng lượng của exciton ở trạng thái cơ bản ở bước lặp thứ 800.

$\omega$	E (s=800)
1.00000	-1.9951755105
2.00000	-1.9975618222
3.00000	-1.9983674421
3.14159	-1.9984403712
4.00000	-1.9987727201
5.00000	-1.9990168707
6.00000	-1.9991801485
7.00000	-1.9992970683
8.00000	-1.9993848479
9.00000	-1.9994528350
10.00000	-1.9995061730
10.44444	-1.9995433599
10.55555	-1.9995304823
10.66666	-1.9995349157
10.77777	-1.9995392082
10.88888	-1.9995433599
10.99999	-1.9995473709
11.00000	-1.9995473709
11.11111	-1.9995512411
11.44444	-1.9995620012
11.88888	-1.9995743257

Theo điều kiện (1.26) ứng trường hợp mức năng lượng cơ bản ta có được tham số  $\omega=3.14$ . Tuy nhiên, với số liệu thu được ở bảng 3.1 cho thấy với  $\omega=3.14$  thì năng lượng trạng thái cơ bản tiến về giá trị chính xác không nhanh.

Trong bảng 3.1 chúng tôi tiến hành khảo sát  $\omega$  trong khoảng từ 1 tới 12, thì nhận thấy khoảng giá trị  $\omega$  từ 11 đến 12 cho giá trị năng lượng cơ bản tiến nhanh về giá trị chính xác. (Lưu ý với giá trị tham số  $\omega > 12$  thì năng lượng cũng tiến về giá trị chính xác rất chậm). Chúng tôi tiếp tục tiến hành khảo sát giá trị năng lượng theo tham số  $\omega$ . Bằng việc giảm bước nhảy giữa các giá trị  $\omega$  trong khoảng 11 tới 12 và tăng số vòng lặp từ 800 lên 1200. Giá trị năng lượng hội tụ tốt hơn, được 7 chữ số sau dấu phẩy (với số vòng lặp 1200) và chính xác hơn. Giá trị tốt nhất mà chúng tôi chọn được  $\omega=11.999999$  (xem bảng 3.2).

Bảng 3.2: Khảo sát năng lượng cơ bản của exciton với vòng lặp 1200

$\omega$	E (s=800)	E(1200)
10.999999	-1.9995473710	-1.9997002885
11.222222	-1.9995549709	-1.9997060578
11.555555	-1.9995653016	-1.9997156791
11.666666	-1.9995684569	-1.9997167969
11.777777	-1.9995714655	-1.9997193197
11.888888	-1.9995743258	-1.9997217789
11.888899	-1.9995743262	-1.9997217791
11.999999	-1.9995770359	-1.9997241749

Bằng việc khảo sát trên, chúng tôi thấy sự hội tụ của bài toán phụ thuộc vào việc chọn tham số  $\omega$ . Tuy nhiên để có được quy trình chọn  $\omega$  một cách tổng quát, cần sự khảo sát chi tiết hơn nữa.

Với các mức năng lượng kích thích, khi mức kích thích càng lớn thì tốc độ hội tụ càng nhanh. Cụ thể ứng với mức năng lượng ở trạng thái kích thích thứ 6 trở đi thì số vòng lặp nhỏ hơn 100 và giá trị năng lượng thu được hoàn toàn phù hợp với kết quả giải tích (bảng 3.3). Điều này cần được khảo sát thêm để có thể tìm ra nguyên nhân.

**Bảng 3.3:** Năng lượng của exciton ở một số trạng thái kích thích n

n	$\omega$	E(s=100)	E(s=400)	E(giải tích)
2	0.323888888	-0.2222059773	-0.2222212928	- 0.2222222222
3	0.077777777	-0.0799995280	-0.0799999991	- 0.0800000000
4	0.024455555	-0.0408163144	-0.0408163276	- 0.0408163276
5	0.111111111	-0.0246913578	-0.0246913587	- 0.0246913587
6	0.005555555	-0.0165289259		- 0.0165289259
7	0.002100000	-0.0118343195		- 0.0118343195
8	0.001122222	- 0.0088888888		- 0.0088888888
9	0.000713000	-0.0069204152		- 0.0069204152

## Kết luận và hướng phát triển đề tài

Các kết quả mà luận văn đã đạt được

- Thiết lập phương trình Schrodinger cho exciton hai chiều, đưa ra lời giải giải tích cho bài toán
- Xây dựng được bộ hàm sóng cơ sở cho bài toán exciton hai chiều theo OM.
- Tìm nghiệm số chính xác cho năng lượng của exciton hai chiều ở trường hợp mức năng lượng cơ bản và một vài trường hợp kích thích.
- Tiến hành khảo sát sự hội tụ của bài toán khi giải bằng OM theo giá trị của của  $\omega$  cho trường hợp năng lượng cơ bản.

### Hướng phát triển đề tài

Hướng phát triển tiếp của đề tài là: tiếp tục khảo sát  $\omega$  để tìm ra quy luật tối ưu hóa tốc độ tính toán, sử dụng các sơ đồ khác nhau để tính toán nghiệm chính xác. Qua đó tìm ra được sơ đồ tính toán thích hợp và ứng dụng OM cho bài toán phức tạp hơn như exciton âm và exciton dương trong từ trường...

## PHỤ LỤC

### Phụ lục 1: Các toán tử sinh – hủy một chiều

#### A. Một số công thức toán tử thông dụng:

$$1. [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}.$$

$$2. [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}].$$

$$3. e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

Chứng minh: Xét hàm  $f(t) = e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}}$ , đạo hàm theo  $t$  ta được:

$$\frac{df}{dt} = \hat{A}e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}} - e^{t\hat{A}}\hat{B}\hat{A}e^{-t\hat{A}} = e^{t\hat{A}}[\hat{A}, \hat{B}]e^{-t\hat{A}}.$$

Tiếp tục tính tương tự ta có đạo hàm bậc  $k$  của  $f(t)$  như sau:

$$\frac{d^k f}{dt^k} = e^{t\hat{A}}[\hat{A}, [\hat{A}, \dots [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]]]e^{-t\hat{A}},$$

trong đó giao hoán tử lấy  $k$  lần.

Mặt khác, khai triển Taylor hàm  $f(t)$  tại điểm  $t_0 = 0$  ta có:

$$f(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \left( \frac{d^k f}{dt^k} \right) \Big|_{t_0=0} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} [\hat{A}, [\hat{A}, \dots [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]]].$$

Cho giá trị  $t = 1$  ta có công thức cần chứng minh.

#### B. Các giao hoán tử thông dụng

$$1. [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$$

$$2. [\hat{a}^2, \hat{a}^+] = \hat{a}[\hat{a}, \hat{a}^+] + [\hat{a}, \hat{a}^+]\hat{a} = 2\hat{a}$$

$$3. [(\hat{a}^+)^2, \hat{a}] = \hat{a}^+[\hat{a}^+, \hat{a}] + [\hat{a}^+, \hat{a}]\hat{a}^+ = -2\hat{a}^+$$

$$4. [\hat{a}, \hat{a}^+ \hat{a}] = [\hat{a}, \hat{a}^+] \hat{a} + \hat{a}^+ [\hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}$$

$$5. [\hat{a}^+, \hat{a}^+ \hat{a}] = [\hat{a}^+, \hat{a}^+] \hat{a} + \hat{a}^+ [\hat{a}^+, \hat{a}] = -\hat{a}^+$$

$$6. [(\hat{a}^+)^2, \hat{a}^+ \hat{a}] = [(\hat{a}^+)^2, \hat{a}^+] \hat{a} + \hat{a}^+ [(\hat{a}^+)^2, \hat{a}] = -2(\hat{a}^+)^2$$

$$7. [\hat{a}^2, \hat{a}^+ \hat{a}] = [\hat{a}^2, \hat{a}^+] \hat{a} + \hat{a}^+ [\hat{a}^2, \hat{a}] = 2\hat{a}^2$$

$$8. [(\hat{a}^+)^2, \hat{a}^2] = [(\hat{a}^+)^2, \hat{a}] \hat{a} + \hat{a} [(\hat{a}^+)^2, \hat{a}] = -2\hat{a}^+ \hat{a} - 2\hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ = -2(2\hat{a}^+ \hat{a} + 1)$$

### C. Toán tử sinh-hủy

Toán tử sinh, hủy một chiều được định nghĩa như sau:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( x + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dx} \right); \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left( x - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dx} \right).$$

$$1. \text{ Giao hoán tử } [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$$

$$\text{Ta có} \quad \hat{a}\hat{a}^+ = \frac{\omega}{2} \left( x + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dx} \right) \left( x - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dx} \right) = \frac{\omega}{2} \left( x^2 + \frac{1}{\omega} - \frac{1}{\omega^2} \frac{d^2}{dx^2} \right),$$

$$\text{và} \quad \hat{a}^+ \hat{a} = \frac{\omega}{2} \left( x - \frac{1}{\omega} \frac{d}{dx} \right) \left( x + \frac{1}{\omega} \frac{d}{dx} \right) = \frac{\omega}{2} \left( x^2 - \frac{1}{\omega} - \frac{1}{\omega^2} \frac{d^2}{dx^2} \right),$$

$$\text{từ đây suy ra} \quad [\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a} = \frac{\omega}{2} \frac{2}{\omega} = 1.$$

$$2. \text{ Chứng minh } \hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle$$

Từ định nghĩa  $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle$  ta suy ra với trường hợp  $n=0$  công thức trên

đúng:  $\hat{a}^+ \hat{a} |0\rangle = 0 = 0 |0\rangle$ . Giả sử ta có  $\hat{a}^+ \hat{a} |n-1\rangle = (n-1) |n-1\rangle$  ta sẽ chứng minh

$$\hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle.$$

Thật vậy:



$$\begin{aligned}\hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^+ \hat{a} (\hat{a}^+)^n |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^+ (\hat{a} \hat{a}^+) (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^+ (\hat{a}^+ \hat{a} + 1) |n-1\rangle.\end{aligned}$$

Từ đây ta có

$$\begin{aligned}\hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^+ (\hat{a}^+ \hat{a} + 1) |n-1\rangle = n \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^+ |n-1\rangle \\ &= n \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^+ \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle = n |n\rangle.\end{aligned}$$

### 3. Chứng minh $\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{a} |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a} (\hat{a}^+)^n |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a} \hat{a}^+) (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (1 + \hat{a}^+ \hat{a}) (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^+ \hat{a} (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} |n-1\rangle + \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^+ \hat{a} |n-1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} |n-1\rangle + \frac{1}{\sqrt{n}} (n-1) |n-1\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle.\end{aligned}$$

Ta thấy rằng mỗi toán tử hủy có tác dụng “hủy” (giảm) đi một bậc của vector trạng thái. Như vậy cứ có bao nhiêu toán tử hủy tác dụng lên vector trạng thái thì sẽ hủy đi bấy nhiêu bậc của nó.

### 4. Chứng minh $\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^{n+1} |0\rangle = \sqrt{n+1} \left( \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} (\hat{a}^+)^{n+1} |0\rangle \right) = \sqrt{n+1} |n+1\rangle.$$

Tương tự, ta cũng thấy rằng mỗi toán tử sinh có tác dụng “sinh” (tăng) lên một bậc của vector trạng thái. Như vậy cứ có bao nhiêu toán tử sinh tác dụng lên vector trạng thái thì sẽ sinh thêm bấy nhiêu bậc của nó.

### 5. Chứng minh sự liên hợp của $\hat{a}, \hat{a}^+$

$$\begin{aligned}\langle n | \hat{a} | j \rangle &= \sqrt{j} \langle n | j-1 \rangle = \sqrt{j} \delta_{n, j-1}, \\ \langle j | \hat{a}^+ | n \rangle &= \sqrt{j} \langle j-1 | n \rangle = \sqrt{j} \delta_{n, j-1}, \\ \Rightarrow \langle n | \hat{a} | j \rangle &= \langle j | \hat{a}^+ | n \rangle.\end{aligned}$$

Nhận xét: Từ các tính chất (3, 4, 5) ở trên ta thấy rằng: nếu như tác dụng một toán tử chứa cùng số toán tử sinh và toán tử hủy lên một vector trạng thái, thì sẽ không làm vector này thay đổi bậc, và ta gọi các toán tử như thế là toán tử “trung hòa”; ngược lại nếu toán tử chứa số toán tử sinh – hủy khác nhau thì sẽ làm thay đổi bậc của vector trạng thái. Đây là một tính chất rất quan trọng trong các tính toán đại số khi sử dụng biểu diễn toán tử và cũng chính là yếu tố để ta tiến hành việc tách toán tử Hamilton của hệ thành hai thành phần: trung hòa và nhiễu loạn.

## Phụ lục 2. **Dạng chuẩn (normal) của một số toán tử trong luận văn**

Dạng chuẩn (normal) của một toán tử được định nghĩa là dạng đã được biến đổi sao cho toán tử hủy luôn về phía bên phải của biểu thức, toán tử sinh luôn về phía bên trái của biểu thức.

$$\hat{a}^+ \longrightarrow \text{trái}$$

$$\hat{a} \longrightarrow \text{phải.}$$

Mục đích của việc đưa các biểu thức toán tử về dạng chuẩn là giúp cho việc tính toán trong các bài toán chứa nhiều loại toán tử được dễ dàng hơn rất nhiều.

Thực vậy, khi biểu diễn tất cả trạng thái qua trạng thái cơ bản  $|0(\omega)\rangle$  thì lợi dụng tính chất  $\hat{a}|0(\omega)\rangle = 0$  và  $\hat{b}|0(\omega)\rangle = 0$ , chúng ta sẽ biểu diễn tất cả trạng thái còn lại qua biểu thức chỉ còn một loại toán tử sinh tác dụng.

### A. Trường hợp các toán tử sinh, hủy với số mũ lũy thừa

Trường hợp này ta chỉ cần áp dụng các tính chất của giao hoán tử trên là có thể đưa về dạng chuẩn.

Ví dụ: Đưa toán tử  $\hat{a}^2 (\hat{a}^+)^2$  về dạng chuẩn ta thực hiện như sau:

$$\begin{aligned} \hat{a}^2 (\hat{a}^+)^2 &= \hat{a} (\hat{a} \hat{a}^+) \hat{a}^+ = \hat{a} (1 + \hat{a}^+ \hat{a}) \hat{a}^+ = \hat{a} \hat{a}^+ + \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ \\ &= (1 + \hat{a}^+ \hat{a}) + (1 + \hat{a}^+ \hat{a}) (1 + \hat{a}^+ \hat{a}) \\ &= 1 + \hat{a}^+ \hat{a} + 1 + 2\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} \\ &= 2 + 3\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a}^+ (1 + \hat{a}^+ \hat{a}) \hat{a} \\ &= 2 + 3\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a}^+ \hat{a} + (\hat{a}^+)^2 \hat{a}^2 \\ &= 2 + 4\hat{a}^+ \hat{a} + (\hat{a}^+)^2 \hat{a}^2. \end{aligned}$$

Các phép biến đổi trên thường được áp dụng khi các biểu thức toán tử có dạng như các đa thức.

## B. Trường hợp hàm e mũ của các toán tử sinh, hủy

Đối với dạng hàm e mũ thì khi vận dụng phép biến đổi như trên sẽ gặp khó khăn. Vì các toán tử sinh hủy trên mũ khi khai triển để đưa về dạng chuẩn sẽ có bậc lũy thừa rất cao. Nên ta phải áp dụng phương pháp biến đổi khác như dưới đây.

Ví dụ:  $e^{t(\hat{a}^+ + \hat{a})}$

Vì ta có hệ thức giao hoán  $[\hat{a}^+, \hat{a}] = 1$  nên từ đây các toán tử  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^+$  và số 1 tạo thành một đại số kín. Như vậy ta có thể viết:

$$e^{t(\hat{a}^+ + \hat{a})} = e^{f(t)\hat{a}^+} e^{g(t)\hat{a}} e^{h(t)} = F(t). \quad (A2.1)$$

và tiến hành tìm các hàm số  $f(t)$ ,  $g(t)$ ,  $h(t)$  theo các bước sau:

**Bước một:** Lấy đạo hàm hai vế của (2.1) theo biến số t ta có:

$$(\hat{a}^+ + \hat{a})e^{t(\hat{a}^+ + \hat{a})} = f'(t)\hat{a}^+ F(t) + g'(t)\hat{a}F(t) + h'(t)F(t). \quad (A2.2)$$

Định nghĩa hàm nghịch đảo của  $F(t)$  là  $F^{-1}(t)$  sao cho  $F(t).F^{-1}(t) = 1$  ta có:

$$F^{-1}(t) = e^{-h(t)} e^{-g(t)\hat{a}} e^{-f(t)\hat{a}^+}. \quad (A2.3)$$

Nhân hai vế (2.2) cho  $F^{-1}(t)$  và thu gọn các số hạng ta được:

$$\hat{a}^+ + \hat{a} = f'(t)\hat{a}^+ + g'(t)e^{f(t)\hat{a}^+} \hat{a} e^{-f(t)\hat{a}^+} + h'(t) \quad (A2.4)$$

**Bước hai:** Sử dụng công thức quen thuộc (phụ lục 1):

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

cùng với hệ thức giao hoán của  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^+$  ta có:

$$e^{f(t)\hat{a}^+} \hat{a} e^{-f(t)\hat{a}^+} = \hat{a} + f(t)[\hat{a}^+, \hat{a}] + \dots = \hat{a} - f(t).$$

Thay vào (2.4), ta có:

$$\begin{aligned} \hat{a}^+ + \hat{a} &= f'(t)\hat{a}^+ + g'(t)(\hat{a} - f(t)) + h'(t) \\ &= f'(t)\hat{a}^+ + g'(t)\hat{a} + h'(t) - g'(t)f(t). \end{aligned} \quad (A2.5)$$

**Bước ba:** Đồng nhất hai vế của (2.5) và chọn điều kiện biên

Đồng nhất hai vế, ta có hệ phương trình:

$$\begin{cases} f'(t) = 1, \\ g'(t) = 1, \\ h'(t) - g'(t)f(t) = 0. \end{cases}$$

Giải hệ này ta có:

$$\begin{cases} f(t) = t + c_1, \\ g(t) = t + c_2, \\ h(t) = \frac{t^2}{2} + c_1t + c_3. \end{cases}$$

Dựa vào biểu thức (2.1), ta có điều kiện khi  $t = 0$  thì:

$$f(t) = g(t) = h(t) = 0.$$

Suy ra:  $c_1 = c_2 = c_3 = 0$ .

Như vậy dạng chuẩn của  $e^{t(\hat{a}^+ + \hat{a})}$  là:

$$e^{t(\hat{a}^+ + \hat{a})} = e^{t\hat{a}^+} e^{t\hat{a}} e^{t^2/2}. \quad (\text{A2.6})$$

## Phụ lục 3: Yếu tố ma trận cho toán tử Hamilton của dao động tử phi điều hòa

### A. Tính các yếu tố ma trận của toán tử Hamilton (phương pháp giải tích)

#### 3.1 Tính các yếu tố ma trận:

Theo [1] ta có:

$$\xi H_n(\xi) = n.H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2}H_{n+1}(\xi).$$

Khi đó yếu tố ma trận H được tính:

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^{(0)*} \hat{H}_0 \Psi_n^{(0)} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^{(0)*} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 \right) \Psi_n^{(0)} dx \\ &= (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^{(0)*} A_n \left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \left( \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \right) + \frac{1}{2} x^2 \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \right] dx \\ &= (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^{(0)*} A_n \left[ -\frac{1}{2} \left( \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} + x^2 \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} + x \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + x \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2} + \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d^{n+2}}{dx^{n+2}} e^{-x^2} \right] + \frac{1}{2} x^2 \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \Bigg] dx \\ &= -\frac{1}{2} \langle n|n \rangle - \frac{A_n}{A_{n+2}} \frac{1}{2} \langle n|n+2 \rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^{(0)*} A_n \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) x \hat{H}_{n+1}(x) dx \\ &= -\frac{1}{2} + n + 1 = n + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

#### 3.2 Tính yếu tố ma trận V

Từ 
$$\xi H_n(\xi) = n.H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2}H_{n+1}(\xi),$$

ta tính được:

$$\xi^2 H_n = n.\xi H_{n-1} + \frac{1}{2}\xi H_{n+1} = \left(n + \frac{1}{2}\right)H_n + (n-1)n.H_{n-2} + \frac{1}{4}H_{n+2},$$

$$\xi^3 H_n(\xi) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\xi H_n + (n-1)n.\xi H_{n-2} + \frac{1}{4}\xi H_{n+2} = \frac{3}{2}n^2 H_{n-1} + n(n-1)(n-2)H_{n-3} + \frac{3}{4}(n+1)H_{n+1} + \frac{1}{8}H_{n+3}$$

$$\xi^4 H_n = \frac{3}{4}(2n^2 + 2n + 1)H_n + \frac{1}{4}(2n + 3)H_{n+2} + \frac{1}{16}H_{n+4} + (n-1)(n-2)(n-3)H_{n-4} + n(n-1)(2n-1)H_{n-2}$$

Tính:

$$\begin{aligned} V_{mm} &= \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^{*(0)}(x) \hat{V} \Psi_n^{(0)} dx = \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^{*(0)}(x) A_n \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) x^4 H_n(x) dx = \\ &= \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^{*(0)} e^{-\frac{x^2}{2}} \left\{ \frac{3}{4} (2n^2 + 2n + 1) H_n + \frac{1}{4} (2n + 3) H_{n+2} + \frac{1}{16} H_{n+4} + n(n-1)(n-2)(n-3) H_{n-4} + n(n-1)(2n-1) H_{n-2} \right\} dx \\ &= \lambda \left\{ \frac{3}{4} (2n^2 + 2n + 1) \delta_{mm} + \frac{A_n}{4A_{n+2}} (2n + 3) \delta_{n+2} + \frac{A_n}{16A_{n+4}} \delta_{n+4} + \frac{A_n}{A_{n-4}} n(n-1)(n-2)(n-3) \delta_{n-4} + \frac{A_n}{A_{n-2}} n(n-1)(2n-1) \delta_{n-2} \right\} \end{aligned}$$

Khi đó:

$$\begin{aligned} V_{n,n+4} &= \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^{*(0)}(x) \hat{V} \Psi_{n+4}^{(0)} dx = \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^{*(0)}(x) A_n \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) x^4 H_{n+4}(x) dx = \frac{\lambda}{4} \sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)} \\ V_{n,n+2} &= \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^{*(0)}(x) \hat{V} \Psi_{n+2}^{(0)} dx = \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^{*(0)}(x) A_n \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) H_{n+2}(x) dx = \frac{\lambda}{2} (2n+3) \sqrt{(n+2)(n+1)} \end{aligned}$$

## B. Tính các yếu tố ma trận của toán tử Hamilton( OM)

Ta có:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1+\omega^2}{4\omega} (2\hat{a}^+ \hat{a} + 1) + \frac{1-\omega^2}{4\omega} [\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2] + \frac{3\lambda}{4\omega^4} [2(\hat{a}^+ \hat{a})^2 + 2\hat{a}^+ \hat{a} + 1] \\ &\quad + \frac{\lambda}{4\omega^2} [\hat{a}^4 + (\hat{a}^+)^4 + 4(\hat{a}^+)^3 \hat{a} + 4\hat{a}^+ \hat{a}^3 + 6(\hat{a}^+)^2 + 6\hat{a}^2]. \end{aligned}$$

Ta tách  $\hat{H}$  thành hai phần:  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ ,

$$\hat{H}_0 = \frac{1+\omega^2}{4\omega} (2\hat{a}^+ \hat{a} + 1) + \frac{3\lambda}{4\omega^2} [2(\hat{a}^+ \hat{a})^2 + 2\hat{a}^+ \hat{a} + 1],$$

$$\hat{V} = \frac{1-\omega^2}{4\omega} (\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2) + \frac{\lambda}{4\omega^2} [(\hat{a}^+)^4 + 4(\hat{a}^+)^3 \hat{a} + 6(\hat{a}^+)^2 + 4\hat{a}^+ \hat{a}^3 + 6\hat{a}^2 + \hat{a}^4].$$

Ta tính các phần tử ma trận khác không của  $\hat{H}$ :

$$\begin{aligned} H_{nn} &= (H_0)_{nn} = \langle n | \frac{1+\omega^2}{4\omega} (2\hat{a}^+ \hat{a} + 1) + \frac{3\lambda}{4\omega^2} [2(\hat{a}^+ \hat{a})^2 + 2\hat{a}^+ \hat{a} + 1] | n \rangle \\ &= \frac{1+\omega^2}{4\omega} (2n+1) + \frac{3\lambda}{4\omega^2} (2n^2 + 2n + 1), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V_{n,n+2} &= \langle n | \frac{1-\omega^2}{4\omega} \hat{a}^2 + \frac{\lambda}{4\omega^2} (4\hat{a}^+ \hat{a}^3 + 6\hat{a}^2) | n+2 \rangle \\ &= \left[ \frac{1-\omega^2}{4\omega} + \frac{\lambda}{4\omega^2} (4n+6) \right] \sqrt{(n+2)(n+1)} = \left[ \frac{1-\omega^2}{4\omega} + \frac{\lambda}{2\omega^2} (2n+3) \right] \sqrt{\frac{(n+2)!}{n!}}, \end{aligned}$$

$$V_{n,n+4} = \langle n | \frac{\lambda}{4\omega^2} \hat{a}^4 | n+4 \rangle = \frac{\lambda}{4\omega^2} \sqrt{\frac{(n+4)!}{n!}};$$

các phần tử ma trận khác được tính dựa vào tính đối xứng:  $V_{nm} = V_{mn}$ .



## Phụ lục 4: Phương trình Schrödinger cho bài toán exciton hai chiều

Theo cơ học cổ điển, năng lượng của hệ gồm hai hạt tương tác

$$E = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + U(r).$$

trong đó  $r$  là khoảng cách giữa hai hạt, một cách tương ứng Hamiltonian của hệ bằng:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + U(r).$$

Gọi  $r_1$  và  $r_2$  là các bán kính vector của hạt 1 và hạt 2,  $r$  là bán kính vector từ hạt 1 sang hạt 2,  $R$  là bán kính vector của tâm bán kính  $G$ .

Chúng ta có các hệ thức:

$$r = r_2 - r_1, R = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2}.$$

Chiều hai biểu thức này xuống trục  $x$  ta có:

$$x = x_2 - x_1; X = \frac{m_1 x_1}{m_1 + m_2} + \frac{m_2 x_2}{m_1 + m_2}.$$

Theo hệ thức trên ta có:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial x_1} = -\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X};$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \left( \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^2 = \left( -\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} \right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2 \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial x \partial X} + \left( \frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2}.$$

Tương tự:

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \left( \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^2 = \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} \right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial x \partial X} + \left( \frac{m_2}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2}.$$

Từ hai biểu thức trên ta có:

$$\frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m_2 + m_1} \frac{\partial^2}{\partial X^2}.$$

Tiến hành trên hai trục còn lại ta thu được

$$\frac{1}{m_1} \nabla_1^2 + \frac{1}{m_2} \nabla_2^2 = \frac{1}{\mu} \nabla_r^2 + \frac{1}{m_2 + m_1} \nabla_G^2,$$

trong đó  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  gọi là khối lượng rút gọn.

Khi đó toán tử Hamitonain có dạng:

$$\hat{H} = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{\hbar^2}{2(m_2 + m_1)} \nabla_G^2 \right) \Psi + U(r) \quad (\text{A4.1})$$

**\* Dạng không thứ nguyên của phương trình thứ (2.9)**

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{Ze^2}{r} \right\} \psi_r(r) = E \psi_r(r).$$

Hamilton có dạng:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{Ze^2}{r}.$$

đặt

$$\rho_x = a.x, \rho_y = a.y \text{ và } E = b\varepsilon;$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = a \frac{\partial}{\partial \rho_x} \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} = a^2 \frac{\partial^2}{\partial \rho_x^2}; r = \sqrt{x^2 + y^2} = \frac{1}{a} \sqrt{\rho_x^2 + \rho_y^2};$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 a^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho_x^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho_y^2} \right) - \frac{aZe^2}{\rho_1} \right\} \psi = b\varepsilon \psi \Rightarrow \left\{ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho_x^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho_y^2} \right) - \frac{\mu e^2 Z}{\hbar^2 a \rho_1} \right\} \psi = \frac{\mu b}{\hbar^2 a^2} \varepsilon \psi.$$

Ta đặt:

$$\frac{\mu e^2}{\hbar^2 a} = 1 \Rightarrow a = \frac{\mu e^2}{\hbar^2} = \frac{1}{r_0};$$

$$\frac{\mu b}{\hbar^2 a^2} = 1 \Rightarrow b = \frac{\hbar^2 a^2}{\mu} = \frac{\mu e^4}{\hbar^2}.$$

Khi đó ta thu được phương trình Schrödinger không thứ nguyên sau:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho_x^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho_y^2} \right) - \frac{Z}{\rho} \right\} \psi = \varepsilon \psi. \quad (\text{A4.2})$$

Để thuận tiện ta có thể viết lại phương trình Schrödinger không thứ nguyên có dạng:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{Z}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right\} \psi = \varepsilon \psi. \quad (\text{A4.3})$$

## Phụ lục 5: Hamilton cho bài toán exciton hai chiều

Chuyển từ tọa độ vuông góc sang hệ tọa độ cực:

$$\begin{cases} x = r \cos \varphi \\ y = r \sin \varphi \end{cases}$$

Chuyển từ tọa độ cực sang hệ tọa độ vuông góc:

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2} \\ \varphi = \arctg \frac{y}{x} \end{cases}.$$

### 1. Toán tử Hamilton $\hat{H}$

Để chuyển toán tử  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$  sang hệ tọa độ cực, ta tiến hành ta tiến hành chuyển các đạo hàm theo tọa độ vuông góc sang tọa độ cực.

Lấy ví dụ là đạo hàm theo biến  $x$ . Theo quy tắc đạo hàm của hàm số hợp:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\text{A5.1})$$

Muốn thực hiện phép chuyển này ta phải tính các đạo hàm riêng:  $\frac{\partial r}{\partial x}, \frac{\partial \varphi}{\partial x}$ ,

$$\begin{cases} \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \cos \varphi \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{1}{r} \sin \varphi \end{cases}, \quad (\text{A5.2})$$

Thay (5.2) vào (5.1) ta được:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[ \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[ \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \\ &= \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{2}{r} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r^2} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{r^2} \sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \end{aligned}$$

Tương tự tính cho  $\frac{\partial}{\partial y}$ , với các đạo hàm riêng:

$$\begin{cases} \frac{\partial r}{\partial y} = \sin \varphi \\ \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{1}{r} \cos \varphi \end{cases};$$

Ta có:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} \left[ \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[ \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \\ &= \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} \left[ \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] + \frac{1}{r} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[ \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \\ &= \sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r^2} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{2}{r} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{r} \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \end{aligned}$$

Khi chuyển  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$  sang hệ tọa độ cực ta được:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \dots$$

Từ công thức của toán tử Laplace trong tọa độ cực, ta có công thức của toán tử Hamilton của electron.

$$\hat{H} = -\frac{1}{2r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{2r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + U(r) \quad (\text{A5.3})$$

## 2. Toán tử $\hat{L}_x$

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (\text{A5.4})$$

Thay các biểu thức ở phần trên vào (3) ta có:

$$\begin{aligned} y \frac{\partial}{\partial z} &= r \sin \theta \sin \varphi \left( \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ z \frac{\partial}{\partial y} &= r \cos \theta \left( \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned}$$

Từ đó ta thu được:

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

### 3. Với toán tử $\hat{L}_y, \hat{L}_z$ :

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Tương tự như toán tử  $\hat{L}_x$ , ta cũng thay các đạo hàm riêng có được ở trên vào:

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

### 4. Tìm riêng và trị riêng của toán tử $\hat{L}_z$

Phương trình hàm riêng- trị riêng của  $\hat{L}_z$ :

$$\hat{L}_z u = L_z u \rightarrow -i \frac{\partial u}{\partial \varphi} = L_z u.$$

Vì hàm  $U$  chỉ phụ thuộc vào biến số  $\varphi$  nên ta thay đạo hàm riêng toàn phần thành đạo hàm toàn phần:

$$-i \frac{du}{d\varphi} = L_z u,$$

$$u(\varphi) = C.e^{iL_z \varphi}$$

hệ số  $C$  được xác định từ điều kiện chuẩn hóa:  $\int_0^{2\pi} |u(\varphi)|^2 d\varphi = 1$ , ta được  $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ .

Khi  $\varphi$  thay đổi một lượng  $2\pi$  thì hạt trở lại vị trí ban đầu. Do đó, để  $u(\varphi)$  xác định đơn giá thì

$$e^{iL_z \varphi} = e^{iL_z (\varphi + 2\pi)}$$

$$e^{i2\pi L_z} = 1$$

$$2\pi L_z = m2\pi$$

$$L_z = m \quad m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

Vậy hàm riêng của toán tử  $\hat{L}_z$  là:  $u(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} . e^{im\varphi}$ ,

và trị riêng là  $L_z = m$        $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$

**Phụ lục 6: Các toán tử sinh – hủy hai chiều**

$$\hat{a}(\omega_x) = \sqrt{\frac{\omega_x}{2}} \left( x + \frac{1}{\omega_x} \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad \hat{a}^+(\omega_x) = \sqrt{\frac{\omega_x}{2}} \left( x - \frac{1}{\omega_x} \frac{\partial}{\partial x} \right),$$

$$\hat{b}(\omega_y) = \sqrt{\frac{\omega_y}{2}} \left( y + \frac{1}{\omega_y} \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{b}^+(\omega_y) = \sqrt{\frac{\omega_y}{2}} \left( y - \frac{1}{\omega_y} \frac{\partial}{\partial y} \right);$$

Suy ra

$$x = \frac{(\hat{a} + \hat{a}^+)}{\sqrt{2\omega}} \rightarrow x^2 = \frac{(\hat{a} + \hat{a}^+)^2}{2\omega}$$

$$y = \frac{(\hat{b} + \hat{b}^+)}{\sqrt{2\omega}} \rightarrow y^2 = \frac{(\hat{b} + \hat{b}^+)^2}{2\omega}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sqrt{\frac{\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sqrt{\frac{\omega}{2}} (\hat{b} - \hat{b}^+)$$

Suy ra :

$$x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{2} (\hat{a} + \hat{a}^+) (\hat{a} - \hat{a}^+) + \frac{1}{2} (\hat{b} + \hat{b}^+) (\hat{b} - \hat{b}^+) = \frac{1}{2} (\hat{a}^2 - \hat{a}^{+2} + \hat{b}^2 - \hat{b}^{+2})$$

Ta có:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\omega_x}{2} (\hat{a} - \hat{a}^+)^2 = \frac{\omega_x}{2} [\hat{a}^2 - 2\hat{a}^+ \hat{a} - 1 + (\hat{a}^+)^2];$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\omega_y}{2} [\hat{b}^2 - 2\hat{b}^+ \hat{b} - 1 + (\hat{b}^+)^2].$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \frac{\omega}{2} \left( (\hat{a} - \hat{a}^+)^2 + (\hat{b} - \hat{b}^+)^2 \right) \\ &= \frac{\omega}{2} (\hat{a}^2 + \hat{b}^2 - 2\hat{a}^+ \hat{a} - 2\hat{b}^+ \hat{b} - 2 + (\hat{a}^+)^2 + (\hat{b}^+)^2) \\ &= \frac{1}{2\omega} (\hat{M} - \hat{N} + \hat{M}^+) \end{aligned}$$

Mặt khác:



$$x^2 = \frac{1}{2\omega_x} \left[ \hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2 + 2\hat{a}^+ \hat{a} + 1 \right];$$

$$y^2 = \frac{1}{2\omega_y} \left[ \hat{b}^2 + (\hat{b}^+)^2 + 2\hat{b}^+ \hat{b} + 1 \right];$$

Suy ra:

$$\begin{aligned} x^2 + y^2 &= \frac{(\hat{a} + \hat{a}^+)^2}{2\omega} + \frac{(\hat{b} + \hat{b}^+)^2}{2\omega} \\ &= \frac{1}{2\omega} \left( \hat{a}^2 + \hat{b}^2 + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{b}\hat{b}^+ + \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b} + (\hat{a}^+)^2 + (\hat{b}^+)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2\omega} (\hat{M} + \hat{N} + \hat{M}^+) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_z &= -ix \left( \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{i}{2} \left( \sqrt{\frac{\omega_x}{\omega_y}} (\hat{b} + \hat{b}^+) (\hat{a} - \hat{a}^+) - \sqrt{\frac{\omega_y}{\omega_x}} (\hat{a} + \hat{a}^+) (\hat{b} - \hat{b}^+) \right) \\ &= \frac{i}{2\sqrt{\omega_x \omega_y}} \left[ (\omega_x - \omega_y) (\hat{a}\hat{b} - \hat{a}^+ \hat{b}^+) + (\omega_x + \omega_y) (\hat{a}\hat{b}^+ - \hat{a}^+ \hat{b}) \right] \end{aligned}$$

Khi  $\omega_x = \omega_y = \omega$ , ta có:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\omega}{2} \left[ \hat{a}^2 + \hat{b}^2 + (\hat{a}^+)^2 + (\hat{b}^+)^2 - 2\hat{a}^+ \hat{a} - 2\hat{b}^+ \hat{b} - 2 \right];$$

$$x^2 + y^2 = \frac{1}{2\omega} \left[ \hat{a}^2 + \hat{b}^2 + (\hat{a}^+)^2 + (\hat{b}^+)^2 + 2\hat{a}^+ \hat{a} + 2\hat{b}^+ \hat{b} + 2 \right].$$

$$\hat{L}_z = i(\hat{a}\hat{b}^+ - \hat{a}^+ \hat{b}).$$

**A. Để thuận tiện trong tính toán, ta sử dụng các toán tử:**

$$\hat{N}_x = 2\hat{a}^+ \hat{a} + 1, \quad \hat{A} = \hat{a}^2, \quad \hat{A}^+ = (\hat{a}^+)^2,$$

$$\hat{N}_y = 2\hat{b}^+ \hat{b} + 1, \quad \hat{B} = \hat{b}^2, \quad \hat{B}^+ = (\hat{b}^+)^2,$$

$$\hat{N} = \hat{N}_x + \hat{N}_y; \quad \hat{M} = \hat{A} + \hat{B}; \quad \hat{M}^+ = \hat{A}^+ + \hat{B}^+$$

trong đó từng bộ ba toán tử  $\hat{N}_x, \hat{A}, \hat{A}^+$ ,  $\hat{N}_y, \hat{B}, \hat{B}^+$ ,  $\hat{M}^+, \hat{M}, \hat{N}$  tạo thành các đại số kín, thỏa mãn các hệ thức giao hoán:

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{A}^+] &= 2\hat{N}_x, & [\hat{A}, \hat{N}_x] &= 4\hat{A}, & [\hat{N}_x, \hat{A}^+] &= 4\hat{A}^+, \\
[\hat{B}, \hat{B}^+] &= 2\hat{N}_y, & [\hat{B}, \hat{N}_y] &= 4\hat{B}, & [\hat{N}_y, \hat{B}^+] &= 4\hat{B}^+, \\
[\hat{M}, \hat{M}^+] &= 2\hat{N}, & [\hat{M}, \hat{N}] &= 4\hat{M}, & [\hat{N}, \hat{M}^+] &= 4\hat{M}^+.
\end{aligned}$$

các giao hoán tử khác bằng 0.

Tính các giao hoán tử:

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{A}^+] &= [\hat{a}^2, (\hat{a}^+)^2] = \hat{a}[\hat{a}, (\hat{a}^+)^2] + [\hat{a}, (\hat{a}^+)^2]\hat{a} \\
&= \hat{a}\hat{a}^+ \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^+]}_{=1} + \hat{a} \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^+]}_{=1}\hat{a}^+ + \hat{a}^+ \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^+]}_{=1}\hat{a} + \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^+]}_{=1}\hat{a}^+\hat{a} \\
&= 2(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+) = 2(2\hat{a}^+\hat{a} + 1) = 2\hat{N}_x
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{N}_x] &= [\hat{a}^2, 2\hat{a}^+\hat{a} + 1] = 2[\hat{a}^2, \hat{a}^+\hat{a}] = 2(\hat{a}[\hat{a}, \hat{a}^+\hat{a}] + [\hat{a}, \hat{a}^+\hat{a}]\hat{a}) \\
&= 2\left(\hat{a}\hat{a}^+ \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}]}_{=0} + \hat{a}[\hat{a}, \hat{a}^+]\hat{a} + \hat{a}^+ \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}]}_{=0}\hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^+]\hat{a}^2\right) \\
&= 4\hat{a}^2 = 4\hat{A}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{N}_x, \hat{A}^+] &= [2\hat{a}^+\hat{a} + 1, (\hat{a}^+)^2] = 2[\hat{a}^+\hat{a}, (\hat{a}^+)^2] = 2\left(\hat{a}^+[\hat{a}, (\hat{a}^+)^2] + \underbrace{[\hat{a}^+, (\hat{a}^+)^2]}_{=0}\hat{a}\right) \\
&= 2\left((\hat{a}^+)^2[\hat{a}, \hat{a}^+] + \hat{a}^+[\hat{a}, \hat{a}^+]\hat{a}^+\right) = 4(\hat{a}^+)^2 = 4\hat{A}^+
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{M}, \hat{M}^+] &= [\hat{A} + \hat{B}, \hat{A}^+ + \hat{B}^+] = [\hat{A}, \hat{A}^+] + \underbrace{[\hat{A}, \hat{B}^+]}_{=0} + \underbrace{[\hat{B}, \hat{A}^+]}_{=0} + [\hat{B}, \hat{B}^+] \\
&= 2\hat{N}_x + 2\hat{N}_y = 2\hat{N}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{M}, \hat{N}] &= [\hat{A} + \hat{B}, \hat{N}_x + \hat{N}_y] = [\hat{A}, \hat{N}_x] + \underbrace{[\hat{A}, \hat{N}_y]}_{=0} + \underbrace{[\hat{B}, \hat{N}_x]}_{=0} + [\hat{B}, \hat{N}_y] \\
&= 4\hat{A} + 4\hat{B} = 4\hat{M}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{N}, \hat{M}^+] &= [\hat{N}_x + \hat{N}_y, \hat{A}^+ + \hat{B}^+] = [\hat{N}_x, \hat{A}^+] + \underbrace{[\hat{N}_x, \hat{B}^+]}_{=0} + \underbrace{[\hat{N}_y, \hat{A}^+]}_{=0} + [\hat{N}_y, \hat{B}^+] \\
&= 4\hat{A}^+ + 4\hat{B}^+ = 4\hat{M}^+
\end{aligned}$$

## B. Chứng minh toán tử $\hat{H}$ giao hoán với toán tử $\hat{L}_z$

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z, \hat{M}^+] &= i(\hat{a}\hat{b}^+ - \hat{a}^+\hat{b})(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b}^+) - (\hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b}^+)i(\hat{a}\hat{b}^+ - \hat{a}^+\hat{b}) \\
&= i(\hat{a}\hat{b}^+\hat{a}^+\hat{a} - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}\hat{b}^+ + \hat{b}^+\hat{b}^+\hat{a}^+\hat{b} - \hat{a}^+\hat{b}\hat{b}^+\hat{b}^+) \\
&= i\left[(\hat{a}^+\hat{a} + 1)\hat{a}^+\hat{b}^+ - \hat{a}^+(\hat{a}\hat{a}^+ - 1)\hat{b}^+ + \hat{b}^+(\hat{b}^+\hat{b} - 1)\hat{a}^+ - (\hat{b}^+\hat{b} + 1)\hat{b}^+\hat{a}^+\right] \\
&= i\left[2\hat{a}^+\hat{b}^+ - 2\hat{a}^+\hat{b}^+\right] = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z, \hat{M}] &= i(\hat{a}\hat{b}^+ - \hat{a}^+\hat{b})(\hat{a}\hat{a} + \hat{b}\hat{b}) - (\hat{a}\hat{a} + \hat{b}\hat{b})i(\hat{a}\hat{b}^+ - \hat{a}^+\hat{b}) \\
&= i(\hat{a}\hat{b}^+\hat{b}\hat{b} - \hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{b}^+ + \hat{a}\hat{a}\hat{a}^+\hat{b} - \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}\hat{b}) \\
&= i\left[-2\hat{a}\hat{b} + 2\hat{a}\hat{b}\right] = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z, \hat{N}] &= i(\hat{a}\hat{b}^+ - \hat{a}^+\hat{b})2(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}\hat{b}^+) - 2(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}\hat{b}^+)i(\hat{a}\hat{b}^+ - \hat{a}^+\hat{b}) \\
&= 2i(\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\hat{b}^+ - \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}\hat{b}^+ + \hat{b}^+\hat{b}\hat{a}\hat{b}^+ - \hat{b}\hat{b}^+\hat{a}\hat{b}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\hat{b} - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^+\hat{a}^+\hat{b} - \hat{b}\hat{b}\hat{a}^+\hat{b}^+) \\
&= 2i(\hat{a}\hat{b}^+ - \hat{a}\hat{b}^+ + \hat{a}\hat{b}^+ - \hat{a}\hat{b}^+) = 0
\end{aligned}$$

### Phụ lục 7: Dạng chuẩn của toán tử $\hat{S} = \exp\{-\tau(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N})\}$

Do các toán tử  $\hat{M}^+, \hat{M}, \hat{N}$  tạo thành một đại số kín, ta có thể sử dụng công thức cho hai toán tử không giao hoán bất kỳ  $\hat{X}, \hat{Y}$ :

$$\exp(\hat{X} + \hat{Y}) = \exp\left(-\frac{1}{2}[\hat{X}, \hat{Y}]\right) \exp(\hat{X}) \exp(\hat{Y}), \quad (\text{A7.1})$$

ta có thể đưa toán tử  $\hat{S}$  về dưới dạng chuẩn như sau:

$$\exp(-\tau(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N})) = \exp(f(\tau) \hat{M}^+) \exp(g(\tau) \hat{N}) \exp(h(\tau) \hat{M}). \quad (\text{A7.2})$$

Ở đây chúng ta cần xác định các hàm số  $f(\tau), g(\tau), h(\tau)$  với điều kiện biên:

$$f(0) = 0, \quad g(0) = 0, \quad h(0) = 0. \quad (\text{A7.3})$$

**Bước một:** Lấy đạo hàm hai vế của (A7.2) theo  $\tau$ :

$$\begin{aligned} -(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N}) \exp(-\tau(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N})) &= \\ &= f'(\tau) \hat{M}^+ \exp(f(\tau) \hat{M}^+) \exp(g(\tau) \hat{N}) \exp(h(\tau) \hat{M}) \\ &\quad + h'(\tau) \exp(f(\tau) \hat{M}^+) \exp(g(\tau) \hat{N}) \hat{M} \exp(h(\tau) \hat{M}). \end{aligned} \quad (\text{A7.4})$$

Nhân (A7.4) với toán tử ngược  $\hat{S}^{-1}$ : với toán tử  $\hat{S} \cdot \hat{S}^{-1} = 1$ ,

$$\begin{aligned} -(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N}) &= f'(\tau) \hat{M}^+ + g'(\tau) \exp(f(\tau) \hat{M}^+) \hat{N} \exp(-f(\tau) \hat{M}^+) \\ &\quad + h'(\tau) \exp(f(\tau) \hat{M}^+) \exp(g(\tau) \hat{N}) \hat{M} \exp(-g(\tau) \hat{N}) \exp(-f(\tau) \hat{M}^+) \end{aligned} \quad (\text{A7.5})$$

**Bước hai:** Ta sử dụng công thức

$$\exp(\hat{X}) \hat{Y} \exp(-\hat{X}) = \hat{Y} + [\hat{X}, \hat{Y}] + \frac{1}{2!} [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] + \frac{1}{3!} [\hat{X}, [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]]] + \dots$$

Tính lần lượt các thành phần của (A7.5):

$$\begin{aligned} I &= g'(\tau) \exp(f(\tau) \hat{M}^+) \hat{N} \exp(-f(\tau) \hat{M}^+) = g'(\tau) \left( \hat{N} + f(\tau) [\hat{M}^+, \hat{N}] + \frac{1}{2!} f^2(\tau) [\hat{M}^+, [\hat{M}^+, \hat{N}]] + \dots \right) \\ &= g'(\tau) \left( \hat{N} + f(\tau)(-4\hat{M}^+) + \frac{1}{2!} f^2(\tau) [\hat{M}^+, -4\hat{M}^+] + \dots \right) \\ &= g'(\tau) (\hat{N} - 4f(\tau) \hat{M}^+) \end{aligned} \quad (\text{A7.6})$$

Trước hết ta tính thành phần:

$$\begin{aligned}
 J &= \exp(g(\tau) \hat{N}) \hat{M} \exp(-g(\tau) \hat{N}) = \hat{M} + g(\tau) [\hat{N}, \hat{M}] + \frac{1}{2!} g^2(\tau) [\hat{N}, [\hat{N}, \hat{M}]] + \dots \\
 &= \hat{M} - 4\hat{M} + \frac{16\hat{M}}{2!} g^2(\tau) + \dots \\
 &= \hat{M} \cdot e^{-4g(\tau)}
 \end{aligned} \tag{A7}$$

.7)

Tiếp theo ta tính thành phần:

$$\begin{aligned}
 K &= h'(\tau) \exp(f(\tau) \hat{M}^+) \exp(g(\tau) \hat{N}) \hat{M} \exp(-g(\tau) \hat{N}) \exp(-f(\tau) \hat{M}^+) \\
 &= e^{-4g(\tau)} h'(\tau) \exp(f(\tau) \hat{M}^+) \hat{M} \exp(-f(\tau) \hat{M}^+) \\
 &= e^{-4g(\tau)} h'(\tau) \left( \hat{M} + f(\tau) [\hat{M}^+, \hat{M}] + \frac{1}{2!} f^2(\tau) [\hat{M}^+, [\hat{M}^+, \hat{M}]] + \dots \right) \\
 &= e^{-4g(\tau)} h'(\tau) (\hat{M} - 2\hat{N}f(\tau) + 4\hat{M}^+ f^2(\tau))
 \end{aligned} \tag{A7.8}$$

Thay vào trong biểu thức:

$$\begin{aligned}
 -(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N}) &= f'(\tau) \hat{M}^+ + g'(\tau) (\hat{N} - 4f(\tau) \hat{M}^+) + e^{-4g(\tau)} h'(\tau) (\hat{M} - 2\hat{N}f(\tau) + 4\hat{M}^+ f^2(\tau)) \\
 &= f'(\tau) \hat{M}^+ + g'(\tau) \hat{N} - 4g'(\tau) f(\tau) \hat{M}^+ + e^{-4g(\tau)} h'(\tau) \hat{M} - 2e^{-4g(\tau)} h'(\tau) \hat{N}f(\tau) + 4e^{-4g(\tau)} h'(\tau) f^2(\tau) \hat{M}^+
 \end{aligned}$$

**Bước ba:** Đồng nhất các hệ số trước các toán tử  $\hat{M}^+$ ,  $\hat{M}$ ,  $\hat{N}$  ta thu được hệ phương trình vi phân trên để xác định các hàm số  $f(\tau)$ ,  $g(\tau)$ ,  $h(\tau)$ :

$$\begin{cases}
 -1 = f'(\tau) - 4g'(\tau)f(\tau) + 4e^{-4g(\tau)}h'(\tau)f^2(\tau) \\
 -1 = -2e^{-4g(\tau)}h'(\tau)f(\tau) + g'(\tau) \\
 -1 = e^{-4g(\tau)}h'(\tau)
 \end{cases} \tag{A7.9}$$

$$\rightarrow f'(\tau) = -(1 + 2f(\tau))^2 \rightarrow f(\tau) = \frac{1}{2} \cdot \frac{-2\tau + 1 - C}{2\tau + C}$$

$$\text{áp dụng điều kiện biên } f(0) = 0 \rightarrow f(0) = \frac{1-C}{2C} = 0 \rightarrow C = 1 \rightarrow f(\tau) = \frac{-\tau}{2\tau + 1} \tag{A7.10}$$

Thay vào trong hệ phương trình:

$$g(\tau) = -\frac{1}{2} \ln|2\tau + 1| + C$$

$$h(\tau) = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\tau+1)} - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{(2\tau+1)} - 1 \right) = \frac{-\tau}{2\tau+1}$$

Áp dụng điều kiện biên:

$$h(\tau) = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\tau+1)} - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{(2\tau+1)} - 1 \right) = \frac{-\tau}{2\tau+1} \quad (\text{A7.11})$$

$$h(\tau) = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\tau+1)} - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{(2\tau+1)} - 1 \right) = \frac{-\tau}{2\tau+1} \quad (\text{A7.12})$$

Như vậy ta đã tìm được dạng chuẩn của toán tử

$$\exp\left(-\tau(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N})\right) = \exp\left(\frac{-\tau}{2\tau+1} \hat{M}^+\right) \exp\left(-\frac{1}{2} \ln|2\tau+1| (\hat{N})\right) \exp\left(\frac{-\tau}{2\tau+1} \cdot \hat{M}\right) \quad (\text{A7.13})$$

**Phụ lục 8: Chuyển toán tử Hamilton qua biểu diễn toán tử sinh – hủy**

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{Z}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-t(x^2+y^2)}}{\sqrt{t}} dt$$

$$\hat{H} = -\frac{\omega}{4} (\hat{M} + \hat{M}^+ - \hat{N}) - \frac{Z}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{dt}{\sqrt{t}} \exp \left[ \frac{-t}{2\omega} (\hat{M}^+ + \hat{N} + \hat{M}) \right]$$

$$\hat{H} = -\frac{\omega}{4} (\hat{M} + \hat{M}^+ - \hat{N}) - Z \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \exp \left[ -\tau (\hat{M}^+ + \hat{N} + \hat{M}) \right]$$

với toán tử có dạng hàm mũ  $\hat{S}(\tau) = \exp \left[ -\tau (\hat{N} + \hat{M} + \hat{M}^+) \right]$  có thể đưa về dạng chuẩn như sau ( xem phụ lục 5):

$$\hat{S}(\tau) = \exp \left( -\frac{\tau}{2\tau+1} \hat{M}^+ \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \ln |2\tau+1| (\hat{N}) \right) \exp \left( -\frac{\tau}{2\tau+1} \hat{M} \right)$$

Khai triển  $\hat{S}$  theo chuỗi Taylor ta được:

$$\begin{aligned} \hat{S} &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{i!j!} \left( \frac{-\tau}{1+2\tau} \right)^{i+j} (\hat{M}^+)^i e^{-\frac{1}{2}\hat{N}\ln(1+2\tau)} \hat{M}^j \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{(i!)^2} \left( \frac{-\tau}{1+2\tau} \right)^{2i} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2\tau)^{\hat{N}/2}} \hat{M}^i + \sum_{\substack{i=0 \\ (i \neq j)}}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{i!j!} \left( \frac{-\tau}{1+2\tau} \right)^{i+j} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2\tau)^{\hat{N}/2}} \hat{M}^j \\ &= \hat{S}_1 + \hat{S}_2 \end{aligned}$$

Khi đó ta có thể tách Hamiltonian thành hai thành phần:

$$\hat{H}_0 = \frac{\omega}{4} \hat{N} - Z \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{(i!)^2} \left( \frac{\tau}{1+2\tau} \right)^{2i} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2\tau)^{\hat{N}/2}} \hat{M}^i,$$

$$\hat{V} = -\frac{\omega}{4} (\hat{M} + \hat{M}^+) - Z \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \sum_{\substack{i=0 \\ (i \neq j)}}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^{i+j}}{i!j!} \left( \frac{\tau}{1+2\tau} \right)^{i+j} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2\tau)^{\hat{N}/2}} \hat{M}^j$$

**Phụ lục 9: Chuẩn hóa bộ hàm sóng cơ sở cho bài toán exciton hai chiều**

Trước hết, ta chọn bộ hàm sóng của dao động tử điều hòa (vì hàm này chắc chắn là nghiệm riêng của các toán tử trung hòa nên sẽ là nghiệm riêng của  $\hat{H}_0$ )

$$|n_x, n_y\rangle = C_{n_x, n_y} (\hat{a}^+)^{n_x} (\hat{b}^+)^{n_y} |0(\omega_x, \omega_y)\rangle,$$

trong đó  $n_x, n_y$  là các số nguyên dương và  $|0\rangle$  là trạng thái chân không được định nghĩa:

$$\hat{a}|0(\omega_x, \omega_y)\rangle = 0, \quad \hat{b}|0(\omega_x, \omega_y)\rangle = 0;$$

và điều kiện chuẩn hóa là  $\langle 0|0\rangle = 1$ .

Như vậy nghiệm riêng của phương trình Schrödinger ta sẽ viết dưới dạng tổ hợp tuyến tính của các vector sóng trên:

$$|\psi\rangle = \sum_{n_x, n_y} C_{n_x, n_y} |n_x, n_y\rangle = \sum_{n_x, n_y} C_{n_x, n_y} (\hat{a}^+)^{n_x} (\hat{b}^+)^{n_y} |0(\omega_x, \omega_y)\rangle.$$

Nhận xét: tổng số mũ của hai toán tử  $\hat{a}^+, \hat{b}^+$  là  $n_x + n_y$ . (\*)

Mặt khác do toán tử  $\hat{L}_z$  là đại lượng bảo toàn nên hàm riêng của phương trình Schrödinger phải đồng thời là hàm riêng của toán tử này:

$$\hat{L}_z |\psi\rangle = m |\psi\rangle, \quad \text{với } \hat{L}_z = i(\hat{b}^+ \hat{a} - \hat{a}^+ \hat{b}).$$

Ta có:

$$\begin{aligned} \hat{L}_z |\psi\rangle &= \sum_{n_x, n_y} C i (\hat{b}^+ \hat{a} - \hat{a}^+ \hat{b}) (\hat{a}^+)^{n_x} (\hat{b}^+)^{n_y} |0(\omega_x, \omega_y)\rangle \\ &= \sum_{n_x, n_y} C i \left[ n_x (\hat{a}^+)^{n_x-1} (\hat{b}^+)^{n_y+1} - n_y (\hat{a}^+)^{n_x+1} (\hat{b}^+)^{n_y-1} \right] |0(\omega_x, \omega_y)\rangle. \end{aligned}$$

Nhận xét: tổng số mũ của hai toán tử  $\hat{a}^+, \hat{b}^+$  vẫn là  $n_x + n_y$ . (\*\*)

Như vậy, từ hai nhận xét (\*) và (\*\*), kết hợp với công thức khai triển nhị thức Newton, ta có thể chọn dạng của hàm sóng cơ sở như sau:



$$|k, m\rangle = C_{km} [(\hat{a}^+)^2 + (\hat{b}^+)^2]^k (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle.$$

Xét:

$$\begin{aligned}\hat{a}(\hat{M}^+)^k &= (\hat{M}^+)^k \hat{a} + [\hat{a}, (\hat{M}^+)^k] = (\hat{M}^+)^k \hat{a} + [\hat{a}, (\hat{M}^+)] (\hat{M}^+)^{k-1} + \hat{M}^+ [\hat{a}, (\hat{M}^+)^{k-1}] \\ &= (\hat{M}^+)^k \hat{a} + [\hat{a}, (\hat{M}^+)] (\hat{M}^+)^{k-1} + \hat{M}^+ [\hat{a}, (\hat{M}^+)] (\hat{M}^+)^{k-2} + (\hat{M}^+)^2 [\hat{a}, (\hat{M}^+)] (\hat{M}^+)^{k-3} + \dots + (\hat{M}^+)^{k-1} [\hat{a}, (\hat{M}^+)] \\ [\hat{a}, \hat{M}^+] &= [\hat{a}, (\hat{a}^+)^2] + [\hat{a}, (\hat{b}^+)^2] = 2\hat{a}^+ \\ [\hat{a}^+, (\hat{M}^+)^k] &= 0 \\ \rightarrow \hat{a}(\hat{M}^+)^k &= (\hat{M}^+)^k \hat{a} + 2\hat{a}^+ (\hat{M}^+)^{k-1} + \dots + (\hat{M}^+)^{k-1} 2\hat{a}^+ \\ &= (\hat{M}^+)^k \hat{a} + 2k(\hat{M}^+)^{k-1} \hat{a}^+.\end{aligned}$$

Tính các toán tử sau:

$$\begin{aligned}\hat{a}^2 (\hat{M}^+)^k &= \hat{a} \left\{ (\hat{M}^+)^k \hat{a} + 2k(\hat{M}^+)^{k-1} \hat{a}^+ \right\} \\ &= (\hat{M}^+)^k \hat{a}^2 + 4k(\hat{M}^+)^{k-1} \hat{a}^+ \hat{a} + 2k(\hat{M}^+)^{k-1} + 4k(k-1)(\hat{M}^+)^{k-2} (\hat{a}^+)^2;\end{aligned}$$

$$\hat{b}^2 (\hat{M}^+)^k = (\hat{M}^+)^k \hat{b}^2 + 4k(\hat{M}^+)^{k-1} \hat{b}^+ \hat{b} + 2k(\hat{M}^+)^{k-1} + 4k(k-1)(\hat{M}^+)^{k-2} (\hat{b}^+)^2;$$

$$\begin{aligned}\rightarrow \hat{M} (\hat{M}^+)^k &= (\hat{M}^+)^k (\hat{a}^2 + \hat{b}^2) + 4k(\hat{M}^+)^{k-1} (\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b} + 1) + 4k(k-1)(\hat{M}^+)^{k-2} [(\hat{a}^+)^2 + (\hat{b}^+)^2] \\ &= (\hat{M}^+)^k \hat{M} + 2k(\hat{M}^+)^{k-1} \hat{N} + 4k(k-1)(\hat{M}^+)^{k-1};\end{aligned}$$

$$(\hat{a} \pm i\hat{b})(\hat{M}^+)^k = (\hat{M}^+)^k (\hat{a} \pm i\hat{b}) + 2k(\hat{M}^+)^{k-1} (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+);$$

$$\hat{a}^+ \hat{a} (\hat{M}^+)^k = (\hat{M}^+)^k \hat{a}^+ \hat{a} + 2k(\hat{M}^+)^{k-1} (\hat{a}^+)^2;$$

$$\hat{b}^+ \hat{b} (\hat{M}^+)^k = (\hat{M}^+)^k \hat{b}^+ \hat{b} + 2k(\hat{M}^+)^{k-1} (\hat{b}^+)^2;$$

$$\hat{N} (\hat{M}^+)^k = 2(\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b} + 1)(\hat{M}^+)^k = 2(\hat{M}^+)^k (\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{b}^+ \hat{b} + 1) + 4k(\hat{M}^+)^k = (\hat{M}^+)^k \hat{N} + 4k(\hat{M}^+)^k$$

Tính

$$\hat{a}|k, m\rangle = C_{km} \hat{a} (\hat{M}^+)^k (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle = C_{km} (\hat{M}^+)^k \hat{a} (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle + 2k C_{km} (\hat{M}^+)^{k-1} \hat{a}^+ (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle$$

$$\hat{a}^+ |k, m\rangle = C_{km} \hat{a}^+ (\hat{M}^+)^k (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle = C_{km} (\hat{M}^+)^k \hat{a}^+ (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle$$

$$\hat{M}^+ |k, m\rangle = C_{km} \hat{M}^+ (\hat{M}^+)^k (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle = C_{km} (\hat{M}^+)^{k+1} (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle$$

$$\begin{aligned} \hat{M} |k, m\rangle &= C_{km} (\hat{M}^+)^k \underbrace{\hat{M} (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle}_{=0} + 2k C_{km} (\hat{M}^+)^{k-1} \hat{N} (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle + 4k(k-1) C_{km} (\hat{M}^+)^{k-1} (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle, \\ &= 4k(k+|m|) \frac{C_{km}}{C_{k-1, m}} |k-1, m\rangle. \end{aligned}$$

Tính :

$$\begin{aligned} \hat{M}^j |k, m\rangle &= 4k(k+|m|) \frac{C_{km}}{C_{k-1, m}} \hat{M}^{j-1} |k-1, m\rangle \\ &= 4^j k(k-1)(k-2)\dots(k-j+1)(|m|+k)(|m|+k-1)\dots(|m|+k-j+1) \frac{C_{km}}{C_{k-j, m}} |k-j, m\rangle \\ &= 4^j \frac{k!(|m|+k)!}{(k-j)!(|m|+k-j)!} \frac{C_{km}}{C_{k-j, m}} |k-j, m\rangle. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\hat{a} \mp i\hat{b}) |k, m\rangle &= C_{km} \left\{ (\hat{M}^+)^k (\hat{a} \mp i\hat{b}) (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} + 2k (\hat{M}^+)^{k-1} (\hat{a}^+ \mp i\hat{b}^+) (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} \right\} |0\rangle \\ &= 2(k+|m|) \frac{C_{km}}{C_{k, m-1}} |k, m-1\rangle \end{aligned}$$

Tính

$$\begin{aligned} (\hat{a} \mp i\hat{b})^l |k, m\rangle &= 2(k+|m|) \frac{C_{km}}{C_{k, m-1}} (\hat{a} \mp i\hat{b})^{l-1} |k, m-1\rangle \\ &= \dots \\ &= 2^l \frac{(k+|m|)!}{(k+|m|-l)!} \frac{C_{km}}{C_{k, m-l}} |k, m-l\rangle. \end{aligned}$$

Từ điều kiện chuẩn hóa ta thu được như sau:

$$\begin{aligned}
\langle m, k | k, m \rangle &= C_{km} \langle 0 | (\hat{a} \mp i\hat{b})^{|m|} \hat{M}^k | k, m \rangle \\
&= 4^k \frac{k!(|m|+k)!}{|m|!} \frac{C_{km}^2}{C_{0,m}} \langle 0 | (\hat{a} \mp i\hat{b})^{|m|} | 0, m \rangle \\
&= 4^k \frac{k!(|m|+k)!}{|m|!} \frac{C_{km}^2}{C_{0,m}} 2^{|m|} (|m|)! C_{0,m} \underbrace{\langle 0 | 0 \rangle}_{=1} \\
&= 2^{2k+|m|} k!(|m|+k)! C_{km}^2 = 1
\end{aligned}$$

$$C_{k,m} = \frac{1}{2^k \sqrt{2^{|m|} k!(|m|+k)!}}.$$

Vậy ta thu được hàm sóng sau khi chuẩn hóa có dạng:

$$|k, m\rangle = \frac{1}{2^k \sqrt{2^{|m|} k!(|m|+k)!}} (\hat{M}^+)^k (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle.$$

Tính các tác dụng của các toán tử lên hàm sóng này:

$$\begin{aligned}
\hat{M} |k, m\rangle &= 2\sqrt{k(k+|m|)} |k-1, |m|\rangle; \\
\hat{M}^+ |k, m\rangle &= 2\sqrt{(k+1)(k+|m|+1)} |k+1, m\rangle; \\
\hat{N} |k, m\rangle &= 2(2k+|m|+1) |k, m\rangle.
\end{aligned}$$

## Phụ lục 10: Các thành phần ma trận cho bài toán exciton hai chiều

Từ điều kiện chuẩn hoá ta thu được bộ hàm cơ sở cho nguyên tử hydro như sau:

$$|k, m\rangle = \frac{1}{2^k \sqrt{2^{|m|} k! (|m| + k)!}} (\hat{M}^+)^k (\hat{a}^+ \pm i\hat{b}^+)^{|m|} |0\rangle.$$

$$\hat{N}|k, m\rangle = 2(2k + |m| + 1)|k, m\rangle;$$

$$\hat{M}|k, m\rangle = 2\sqrt{k(k + |m|)}|k - 1, |m|\rangle;$$

$$\hat{M}^j|k, m\rangle = 2^j \sqrt{\frac{(k)! (k + |m|)!}{(k - j)! (k + |m| - j)!}} |k - j, |m|\rangle;$$

$$\hat{M}^+|k, m\rangle = 2\sqrt{(k + 1)(k + |m| + 1)}|k + 1, m\rangle;$$

$$(\hat{M}^+)^i|k, m\rangle = 2^i \sqrt{\frac{(k + i)! (k + |m| + i)!}{(k)! (k + |m|)!}} |k + i, |m|\rangle.$$

### \* Tính thành phần ma trận của toán tử $\hat{S}$

Do toán tử  $\hat{S}$  được tách làm hai thành phần, ta tiến hành tính lần lượt các thành phần ma trận của toán tử  $\hat{S}$  là  $\hat{S}_1, \hat{S}_2$  như sau:

$$\begin{aligned} \hat{S}_1|k, m\rangle &= \left( \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{(i!)^2} \left( \frac{-\tau}{1 + 2\tau} \right)^{2i} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1 + 2\tau)^{\hat{N}/2}} \hat{M}^i \right) |k, m\rangle \\ &= \left( \sum_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} \left( \frac{-\tau}{1 + 2\tau} \right)^{2i} 2^i \sqrt{\frac{(k)! (k + |m|)!}{(k - i)! (k + |m| - i)!}} \frac{1}{(1 + 2\tau)^{(2k - 2i + |m| + 1)}} 2^i \sqrt{\frac{(k)! (k + |m|)!}{(k - i)! (k + |m| - i)!}} \right) |k, m\rangle \\ &= \left( \sum_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} (-2\tau)^{2i} \frac{(k)! (k + |m|)!}{(k - i)! (k + |m| - i)!} \frac{1}{(1 + 2\tau)^{(2k + |m| + 1)}} \right) |k, m\rangle \end{aligned}$$

Thành phần  $\hat{S}_2$ :

$$\begin{aligned}
 \hat{S}_2 |k, m\rangle &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{\substack{j=0 \\ (i \neq j)}}^{\infty} \frac{1}{i!j!} \left( \frac{-\tau}{1+2\tau} \right)^{i+j} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2\tau)^{\hat{N}/2}} \hat{M}^j |k, m\rangle \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{\substack{j=0 \\ (i \neq j)}}^k \frac{1}{i!j!} \left( \frac{-\tau}{1+2\tau} \right)^{i+j} 2^j \sqrt{\frac{(k)! (k+|m|)!}{(k-j)! (k+|m|-j)!}} \frac{1}{(1+2\tau)^{(2k-2j+|m|+1)}} 2^i \sqrt{\frac{(k+i-j)! (k+|m|+i-j)!}{(k-j)! (k+|m|-j)!}} |k+i-j, m\rangle \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{\substack{j=0 \\ (i \neq j)}}^k \frac{1}{i!j!} (-2\tau)^{i+j} \frac{\sqrt{(k)! (k+|m|)! (k+i-j)! (k+|m|+i-j)!}}{(k-j)! (k+|m|-j)!} \frac{1}{(1+2\tau)^{(2k-j+i+|m|+1)}} |k+i-j, m\rangle
 \end{aligned}$$

Khi đó ta tính

$$\begin{aligned}
 \langle m, k | \hat{S}_1 | k, m \rangle &= \langle m, k+s | \left( \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{(i!)^2} \left( \frac{-\tau}{1+2\tau} \right)^{2i} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2\tau)^{\hat{N}/2}} \hat{M}^i \right) | k, m \rangle \\
 &= \sum_{i=0}^k \frac{(-2\tau)^{2i}}{(i!)^2} \frac{(k)! (k+|m|)!}{(k-i)! (k+|m|-i)!} \frac{1}{(1+2\tau)^{(2k+|m|+1)}} \underbrace{\langle m, k | k, m \rangle}_{=1} \\
 &= \sum_{i=0}^k \frac{(-2\tau)^{2i}}{(i!)^2} \frac{(k)! (k+|m|)!}{(k-i)! (k+|m|-i)!} \frac{1}{(1+2\tau)^{(2k+|m|+1)}}
 \end{aligned}$$

Tính

$$\begin{aligned}
 \langle m, k+s | \hat{S}_2 | k, m \rangle &= \langle m, k+s | \left( \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{\substack{j=0 \\ (i \neq j)}}^{\infty} \frac{1}{i!j!} \left( \frac{-\tau}{1+2\tau} \right)^{i+j} (\hat{M}^+)^i \frac{1}{(1+2\tau)^{\hat{N}/2}} \hat{M}^j \right) | k, m \rangle \\
 &= \sum_{i=0}^{k+s} \sum_{\substack{j=0 \\ (i \neq j)}}^k \frac{1}{i!j!} \left( \frac{-2\tau}{1+2\tau} \right)^{i+j} \frac{\sqrt{(k)! (k+|m|)! (k+i-j)! (k+|m|+i-j)!}}{(k-j)! (k+|m|-j)!} \frac{1}{(1+2\tau)^{\frac{1}{2}(4k-4j+m+2)}} \langle m, k+s | k+i-j, m \rangle \\
 &= \sum_{i=0}^{k+s} \sum_{\substack{j=0 \\ (i \neq j)}}^k \frac{1}{i!j!} \left( \frac{-2\tau}{1+2\tau} \right)^{i+j} \frac{\sqrt{(k)! (k+|m|)! (k+i-j)! (k+|m|+i-j)!}}{(k-j)! (k+|m|-j)!} \frac{1}{(1+2\tau)^{(2k-2j+m+1)}} \delta_{s, i-j} \\
 &= \sum_{i=s}^{k+s} \frac{(-2\tau)^{2i-s}}{i!(i-s)!} \frac{\sqrt{(k)! (k+|m|)! (k+s)! (k+|m|+s)!}}{(k+s-i)! (k+|m|+s-i)!} \frac{1}{(1+2\tau)^{(2k+s+m+1)}}
 \end{aligned}$$

\* Tính các phần tử ma trận:

$$\begin{aligned}
 H_{km,km} &= \langle m, k | \hat{H}_0 | k, m \rangle = \langle m, k | \frac{\omega}{4} \hat{N} - Z \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \hat{S}_1 | k, m \rangle \\
 &= \frac{\omega}{4} 2(2k + |m| + 1) - Z \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \sum_{i=0}^k \frac{(-2\tau)^{2i}}{(i!)^2} \frac{(k)! (k + |m|)!}{(k-i)! (k + |m| - i)!} \frac{1}{(1 + 2\tau)^{(2k + |m| + 1)}} \\
 &= \frac{\omega}{2} (2k + |m| + 1) - Z \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} \sum_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} \frac{(k)! (k + |m|)!}{(k-i)! (k + |m| - i)!} \int_0^{+\infty} \frac{(-2\tau)^{2i}}{(1 + 2\tau)^{(2k + |m| + 1)}} \sqrt{2} d(\sqrt{2\tau})
 \end{aligned}$$

$$\text{Đặt } t = \sqrt{2\tau} \rightarrow dt = \frac{d\tau}{\sqrt{2\tau}}$$

$$\begin{aligned}
 H_{k,k} &= \frac{\omega}{2} (2k + |m| + 1) - 2Z \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} \sum_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} \frac{(k)! (k + |m|)!}{(k-i)! (k + |m| - i)!} \int_0^{+\infty} \frac{(-2\tau)^{2i}}{(1 + 2\tau)^{(2k + |m| + 1)}} dt \\
 &= \frac{\omega}{2} (2k + |m| + 1) - Z \sqrt{\omega} \sum_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} \frac{(k)! (k + |m|)!}{(k-i)! (k + |m| - i)!} I_{2k + |m| + 1}^{2i}
 \end{aligned}$$

$$\text{với } I_p^q = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} dt \frac{(-t^2)^q}{(1 + t^2)^p} = \frac{\sqrt{\pi} (-1)^q (2p - 2q - 3)!! (2q - 1)!!}{2^{p-1} (p - 1)!}$$

$\left( \begin{matrix} p > q \geq 0 \\ p, q \in \mathbb{Z} \end{matrix} \right)$

$$\begin{aligned}
 H_{km, (k+s, m)} &= H_{(k+s, m), km} = \langle m, k + s | \hat{V} | k, m \rangle = \langle m, k + s | -\frac{\omega}{4} (\hat{M} + \hat{M}^+) - Z \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \hat{S}_2 | k, m \rangle \\
 &= -\frac{\omega}{4} \left( 2\sqrt{k(k + |m|)} \delta_{k+s, k-1} + 2\sqrt{(k+1)(k + |m| + 1)} \delta_{k+s, k+1} \right) \\
 &\quad - Z \sqrt{\frac{2\omega}{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{\substack{j=0 \\ (i \neq j)}}^k \frac{1}{i! j!} \left( \frac{-2\tau}{1 + 2\tau} \right)^{i+j} \frac{\sqrt{(k)! (k + |m|)! (k + s)! (k + |m| + s)!}}{(k + s - i)! (k + |m| + s - i)!} \frac{1}{(1 + 2\tau)^{(2k + s + m + 1)}} \delta_{k+s, k+i-j} \\
 &= -\frac{\omega}{2} \left( \sqrt{k(k + |m|)} \delta_{s, -1} + \sqrt{(k+1)(k + |m| + 1)} \delta_{s, 1} \right) \\
 &\quad - 2Z \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} \sum_{i=s}^{k+s} \frac{1}{i! (i - s)!} \frac{\sqrt{(k)! (k + |m|)! (k + s)! (k + |m| + s)!}}{(k + s - i)! (k + |m| + s - i)!} \int_0^{+\infty} \frac{(-t^2)^{2i-s}}{(1 + t^2)^{(2k + s + |m| + 1)}} \\
 &= -\frac{\omega}{2} \left( \sqrt{k(k + |m|)} \delta_{s, -1} + \sqrt{(k+1)(k + |m| + 1)} \delta_{s, 1} \right) \\
 &\quad - Z \sqrt{\omega} \sum_{i=s}^{k+s} \frac{1}{i! (i - s)!} \frac{\sqrt{(k)! (k + |m|)! (k + s)! (k + |m| + s)!}}{(k + s - i)! (k + |m| + s - i)!} I_{2k + |m| + s + 1}^{2i-s} \\
 H_{(k, m), (k-s, m)} &= H_{(k-s, m), (k, m)} = H_{(k_1, m), (k_1 + s, m)} \quad (k_1 = k - s)
 \end{aligned}$$

$$H_{k,k+1} = -\frac{\omega}{2} \sqrt{(k+1)(k+|m|+1)} - Z\sqrt{\omega} \sum_{i=1}^{k+1} \frac{1}{i!(i-1)!} \frac{\sqrt{(k)! (k+|m|)! (k+1)! (k+|m|+1)!}}{(k+1-i)! (k+|m|+1-i)!} I_{2k+|m|+2}^{2i-1}$$

$$H_{k,k+s} = -Z\sqrt{\omega} \sum_{i=s}^{k+s} \frac{1}{i!(i-s)!} \frac{\sqrt{(k)! (k+|m|)! (k+s)! (k+|m|+s)!}}{(k+s-i)! (k+|m|+s-i)!} I_{2k+|m|+s+1}^{2i-s}$$

\* **Xác định  $f(\omega)$ :**

$$\text{Ta có: } \varepsilon_k^{(0)} = H_{kk} = \frac{\omega}{2} (2k+|m|+1) - Z\sqrt{\omega} \sum_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} \frac{(k)! (k+|m|)!}{(k-i)! (k+|m|-i)!} I_{2k+|m|+1}^{2i}$$

$$0 = \frac{\partial \varepsilon_n^{(0)}}{\partial \omega} = \frac{1}{2} (2k+|m|+1) - \frac{Z}{2\sqrt{\omega}} \sum_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} \frac{(k)! (k+|m|)!}{(k-i)! (k+|m|-i)!} I_{2k+|m|+1}^{2i}$$

$$\omega = \left[ \frac{Z}{(2k+|m|+1)} \sum_{i=0}^k \frac{1}{(i!)^2} \frac{(k)! (|m|+k)!}{(k-i)! (|m|+k-i)!} I_{2k+|m|+1}^{2i} \right]^2.$$

## Phụ lục 11: Hàm Gamma

Hàm Gamma được định nghĩa bằng đẳng thức tích phân sau đây:

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha-1} dx \quad (\alpha > 0)$$

Tính tích phân từng phần, ta có:

$$\Gamma(\alpha+1) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha} dx - \int_0^{\infty} x^{\alpha} d(e^{-x}) = -x^{\alpha} e^{-x} \Big|_0^{\infty} + \alpha \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha-1} dx = \alpha \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha-1} dx$$

$$\text{hay } \Gamma(\alpha+1) = \alpha \Gamma(\alpha)$$

Khi  $\alpha=1$  và  $\alpha=\frac{1}{2}$ , hàm  $\Gamma(\alpha)$  có giá trị:

$$\Gamma(1)=1, \quad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi}$$

Từ đó ta xác định được giá trị của hàm  $\Gamma(\alpha)$  đối với các  $\alpha$  nguyên và bán nguyên như sau:

$$\Gamma(n) = (n-1)!$$

$$\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi}$$

trong đó  $n=1,2,3,\dots$

Đối với các giá trị khác của  $\alpha$ , hàm  $\Gamma(\alpha)$  có thể tìm trong các bảng riêng.

$$\text{Tích phân có dạng } I_p^q = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} dt \frac{(-t^2)^q}{(1+t^2)^p} = \frac{(-1)^q \Gamma\left(p-q-\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(q+\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{\pi} \Gamma(p)}$$

$\left(\begin{smallmatrix} p>q\geq 0 \\ p,q\in\mathbb{Z} \end{smallmatrix}\right)$



```

In[4]:=  $\int_0^{\infty} \frac{(-t^2)^q}{(1+t^2)^p} dt$ 

Out[4]:= If[Re[p] >  $\frac{1}{2}$  + Re[q] &&  $\frac{1}{2}$  + Re[q] > 0,

$$\frac{(-1)^q \Gamma\left[-\frac{1}{2} + p - q\right] \Gamma\left[\frac{1}{2} + q\right]}{2 \Gamma[p]},$$

Integrate[ $(-t^2)^q (1+t^2)^{-p}$ , {t, 0,  $\infty$ },
Assumptions  $\rightarrow$  Re[p]  $\leq \frac{1}{2}$  + Re[q] ||  $\frac{1}{2}$  + Re[q]  $\leq 0$ ]]

```

với 
$$\Gamma\left(p - q - \frac{1}{2}\right) = \Gamma\left(p - q - 1 + \frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}(2p - 2q - 3)!!}{2^{p-q-1}},$$

$$\Gamma\left(q + \frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}(2q - 1)!!}{2^q},$$

$$\Gamma(p) = (p - 1)!$$

khi đó tích phân có dạng:

$$I_{\substack{p \\ (p > q \geq 0) \\ (p, q \in \mathbb{Z})}}^q = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} dt \frac{(-t^2)^q}{(1+t^2)^p} = \frac{\sqrt{\pi}(-1)^q (2p - 2q - 3)!!(2q - 1)!!}{2^{p-1}(p - 1)!}, \text{ với } p, q = 1, 2, 3 \dots$$

## Phụ lục 12: Lập trình fortran cho mức năng lượng của exciton hai chiều

```
c Calculate Exciton2D excited energy
PROGRAM MAIN
integer i,m,k
double precision w,Hmatrix
* From the minimum of energy -> omega=Pi
w=0.0021
m=6
k=0
CALL MAINSUB(w,k,m)
END

* MAIN subroutine calculate approximated energy

SUBROUTINE MAINSUB(w,k,m)
INTEGER Z,i,j,s,L,m,k
DOUBLE PRECISION w,Hmatrix,E,C,H,tuso,mauso,temp,msum
PARAMETER (smax=100,kmax=101)
* Chu y thay kmax=smax+k
DIMENSION E(0:smax),C(0:kmax,0:smax),H(0:kmax,0:kmax)
Z=1
* Initialize matrix Hmatrix
DO i=0,smax+k
write(*,*) i
DO j=0,i
H(i,j)= Hmatrix(w,Z,m,i,j)
H(j,i)=H(i,j)
ENDDO
ENDDO
WRITE(*,*) 'Hmatrix done!'
* Initialize C coefficient matrix
DO i=0,smax
DO j=0,smax+k
C(j,i)=0.0
ENDDO
C(k,i)=1.0
ENDDO
WRITE(*,*) 'C matrix done!'
```

```

* Initialize E(s)
DO i=0,smax
    E(i)=0.0
ENDDO
E(0)=H(k,k)
* Calculate E(s): Energy in s th approximation
OPEN(10,FILE='Energy.dat',STATUS='Unknown')
WRITE(10,*) 's=0','E=',E(0)
DO s=1,smax
* Calculate C(L,s)

DO L=0,s+k
IF (L.NE.k) THEN
    tuso=H(L,k)
    mauso=E(s-1)-H(L,L)
    DO i=0,k+s
        IF (i.NE.k.AND.i.NE.L) THEN
            tuso=tuso+C(i,s-1)*H(L,i)
        ENDIF
    ENDDO
    IF (mauso.EQ.(0.0)) STOP 'Error, division by zero'
    C(L,s)=tuso/mauso
ENDIF
ENDDO
* Calculate E(s) from C(L,s)
msum=0.0
DO L=0,k+s
    IF (L.NE.k) msum=msum+C(L,s)*H(L,k)
ENDDO
E(s)=H(0,0)+msum
WRITE(10,*) 's=',s,'E=',E(s)
ENDDO
RETURN
END

* function calculate Hmatrix

C Calculate elements of H matrix H(omega,Z,m,row,col)
FUNCTION Hmatrix(w,Z,m,row,col)
INTEGER Z,row,col,r,c,s,k,p,q,I,m1
DOUBLE PRECISION Hmatrix,w,H,msum,coeff1,coeff2
PARAMETER (pi=3.14159265358979323846)

```

```

    IF (row<0.OR.col<0) STOP 'Error! Wrong matrix indexes!'
* Note: H(row,col)=H(col,row)
    IF (row.LT.col) THEN
        r=col
        c=row
    ELSE
        r=row
        c=col
    ENDIF
    s=r-c
    k=c
    m1=ABS(m)
    IF (s.EQ.0) THEN
* Calculate Hkk
        msum= 0.0
        p=2*k+m1+1
        DO i=0,k
            msum=msum+coeff1(k,i,k+m1,i,p,2*i)
        ENDDO
        H=w/2.0*p-Z*SQRT(w*pi)*msum
    ELSEIF (s.EQ.1) THEN
* Calculate Hk,k+1
        msum= 0.0
        p=2*k+m1+2
        DO i=1,k+1
            msum=msum
            & +coeff2(k,k+1,k+1-i,m1)*coeff1(k,i-1,k+1,i,p,2*i-1)
        ENDDO
        H=(-1.0)*w/2.0*SQRT((k+1.0)*(k+m1+1.0))-Z*SQRT(w*pi)*msum
    ELSE
* Calculate Hk,k+s,s>1
        msum= 0.0
        p=2*k+s+m1+1
        DO i=s,k+s
            msum=msum
            & +coeff2(k,k+s,k+s-i,m1)*coeff1(k,i-s,k+s,i,p,2*i-s)
        ENDDO
        H=(-1.0)*Z*SQRT(w*pi)*msum
    ENDIF
    Hmatrix=H
    RETURN

```

```
END
function calculate coefficient 1, 2
c function coeff1
FUNCTION coeff1(n1,k1,n2,k2,p,q)
INTEGER n1,k1,n2,k2,p,q
INTEGER i1,i2,i3,i4,i5,ii1,ii2,ii3,ii4,ii5
DOUBLE PRECISION coeff1,temp,kq,maxnum,minnum
maxnum=1.79769D308
minnum=3.00000D-308
kq=1.0
ii1=1
ii2=1
ii3=1
ii4=1
ii5=1
11 IF ((ii1.LE.k1.OR.ii2.LE.k2.OR.ii3.LE.(p-q-1).OR.ii4.LE.q)
& .OR.ii5.LE.(p-1)) THEN
DO i1=ii1,k1
temp=kq*(n1-i1+1.0)/DBLE(i1)
IF (temp.GT.maxnum.OR.temp.LT.minnum) EXIT
kq=temp
ENDDO
ii1=i1
DO i2=ii2,k2
temp=kq*(n2-i2+1.0)/DBLE(i2)
IF (temp.GT.maxnum.OR.temp.LT.minnum) EXIT
kq=temp
ENDDO
ii2=i2
DO i3=ii3,(p-q-1)
temp=kq*(2.0*i3-1.0)
IF (temp.GT.maxnum.OR.temp.LT.minnum) EXIT
kq=temp
ENDDO
ii3=i3
DO i4=ii4,q
temp=kq*(2.0*i4-1.0)
IF (temp.GT.maxnum.OR.temp.LT.minnum) EXIT
kq=temp
ENDDO
ii4=i4
```

```
        DO i5=ii5,p-1
            temp=kq/(2.0*i5)
            IF (temp.GT.maxnum.OR.temp.LT.minnum) EXIT
            kq=temp
        ENDDO
        ii5=i5
GOTO 11
ENDIF

IF (q.GT.0.AND.MOD(q,2).NE.0) kq=kq*(-1.0)
coeff1=kq
RETURN
END

c function coeff2
FUNCTION coeff2(k1,k2,k3,m)
INTEGER i,k1,k2,k3,m
DOUBLE PRECISION coeff2,temp
temp=1.0
DO i=1,m
    temp=temp*SQRT(DBLE((k1+i)*(k2+i)))/DBLE(k3+i)
ENDDO
coeff2=temp
END
```

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

### Tiếng Việt

- [1]. Hoàng Dũng (1999), *Nhập môn cơ học lượng tử- Tập I*, Nhà xuất bản Giáo dục
- [2]. Vũ Văn Hùng (2004), *Cơ học lượng tử*, Nhà xuất bản Giáo dục.
- [3]. Lê Văn Hoàng (2004), *Phương pháp đại số giải phương trình Schrödinger cho nguyên tử Hydro trong từ trường với cường độ bất kỳ*, Đề tài Khoa học công nghệ cấp cơ sở CS.2004.23.59
- [4]. Lê Văn Hoàng (2005), *Phổ năng lượng trạng thái exciton của khí điện tử hai chiều tạo ra do hệ nhiều lớp GaAs/GaAsAl trong từ trường đều*, Đề tài KHCN cấp bộ B2005.23.72.
- [5]. Đặng Quang Khang (2006), *Cơ học lượng tử*, Nhà xuất bản Khoa Học Kỹ Thuật.
- [6]. Nguyễn Hữu Minh (2007), *Bài tập cơ học lượng tử tập II*, Nhà xuất bản Giáo dục.
- [7]. Hoàng Đỗ Ngọc Trâm (2008), *Phương pháp toán tử giải phương trình Schodinger cho exciton hai chiều trong từ trường đều với cường độ bất kỳ*, Luận văn Thạc sĩ. Khoa Vật lý trường Đại học KHTN Tp. Hồ Chí Minh

### Tiếng Anh

- [8]. Le Van Hoang, Hoang Do Ngoc Tram, Lu Thanh Trung (2005), *Analytical Solution of 2D Exciton in a Magnetic Field*, *Communications in Physics, Supplement 2005*, p.101-106
- [9]. S. H. Patil (2008) *The helium atom and isoelectronic ions in two dimensions*, *Eur. J. Phys.*29(2008)517–525.

**MỤC LỤC**

<b>MỞ ĐẦU .....</b>	<b>1</b>
<b>Chương 1: GIỚI THIỆU PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ (OM) QUA BÀI TOÁN</b>	
<b>DAO ĐỘNG TỬ PHI ĐIỀU HÒA .....</b>	<b>5</b>
1.1 Sơ đồ Rayleigh- Schrödinger cho phương pháp nhiễu loạn dừng .....	5
1.2 Phương pháp nhiễu loạn và dao động tử phi điều hòa.....	8
1.3 Phương pháp toán tử cho bài toán dao động tử phi điều hòa .....	10
<b>Chương 2: EXCITON - BÀI TOÁN EXCITON HAI CHIỀU .....</b>	<b>17</b>
2.1 Exciton .....	17
2.1.1 Khái niệm exciton .....	17
2.1.2 Phân loại exciton .....	17
2.1.3 Tính chất của exciton.....	18
2.2 Bài toán exciton hai chiều .....	19
2.2.1 Phương trình Schrödinger cho exciton hai chiều .....	19
2.2.2 Phương pháp giải tích cho bài toán exciton hai chiều .....	20
<b>Chương 3: PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ CHO BÀI TOÁN EXCITON</b>	
<b>HAI CHIỀU.....</b>	<b>25</b>
3.1 Phương trình Schrödinger cho exciton hai chiều biểu diễn	
qua toán tử sinh hủy.....	25
3.2 Phương pháp toán tử giải bài toán exciton hai chiều .....	28
<b>KẾT LUẬN VÀ HƯỚNG PHÁT TRIỂN ĐỀ TÀI .....</b>	<b>36</b>
<b>PHỤ LỤC .....</b>	<b>37</b>
Phụ lục 1: Các toán tử sinh – hủy một chiều.....	37
Phụ lục 2: Dạng chuẩn (normal) của một số toán tử trong luận văn.....	41
Phụ lục 3: Yếu tố ma trận của toán tử Hamilton của dao động tử	



phi điều hòa .....	44
Phụ lục 4: Phương trình Schrödinger cho bài toán exciton hai chiều.....	47
Phụ lục 5: Hamilton cho bài toán exciton hai chiều .....	50
Phụ lục 6: Các toán tử sinh – hủy hai chiều .....	54
Phụ lục 7 : Dạng chuẩn của toán tử $\hat{S} = \exp\{-\tau(\hat{M}^+ + \hat{M} + \hat{N})\}$ .....	58
Phụ lục 8: Chuyển toán tử Hamilton qua biểu diễn toán tử sinh –hủy .....	61
Phụ lục 9: Chuẩn hóa bộ hàm sóng cơ sở cho bài toán exciton hai chiều .....	62
Phụ lục 10: Các thành phần ma trận cho bài toán exciton hai chiều .....	66
Phụ lục 11: Hàm Gamma.....	70
Phụ lục 12: Lập trình Fortran cho năng lượng exciton hai chiều.....	72
TÀI LIỆU THAM KHẢO .....	77