**TRANG THÔNG TIN VỀ LUẬN ÁN**

**Tên đề tài luận án:** Khảo sát phổ exciton trong hệ bán dẫn hai chiều

**Ngành/ Chuyên ngành:** Vật lý lý thuyết và Vật lý toán

**Mã số:** 62440101

**Họ tên nghiên cứu sinh:** Nguyễn Phương Duy Anh

**Khóa đào tạo:** 22/2012

**Người hướng dẫn khoa học:** GS.TSKH. Lê Văn Hoàng

**Cơ sở đào tạo:** Trường Đại học Khoa học Tự nhiên- ĐHQG.HCM

**1. TÓM TẮT NỘI DUNG LUẬN ÁN:**

Luận án đã khảo sát phổ năng lượng exciton trong cấu trúc bán dẫn hai chiều nói chung và trong đơn lớp của hợp chất kim loại chuyển tiếp (transition metal dichalcogenides – TMD) bằng phương pháp toán tử FK. Thế chắn Keldysh đã được sử dụng để mô tả tương tác electron - lỗ trống trong các đơn lớp TMD như WS­2, WSe2, và kết quả tính toán phù hợp với các số liệu thực nghiệm mới nhất. Lời giải số chính xác cao này được sử dụng để phân tích ảnh hưởng của thế chắn lên hiệu ứng từ trường. Ngoài ra, một phương pháp mới được đưa ra để trích xuất các tham số cấu trúc như khối lượng hiệu dụng, độ dài chắn từ phổ năng lượng exciton. Sử dụng các phổ năng lượng exciton thực nghiệm mới nhất, các tham số cấu trúc cho WS­2, WSe2 được dự đoán và so sánh với các giá trị thực nghiệm khác.

**2. NHỮNG KẾT QUẢ MỚI CỦA LUẬN ÁN:**

Các kết quả mới của luận án đạt được như sau:

* Thu được biểu thức giải tích  cho năng lượng của exciton hai chiều không có thế chắn trong từ trường cho các trạng thái , ,, , ,  với độ chính xác dưới 1%. Quy trình tổng quát có thể áp dụng cho trạng thái bất kỳ.
* Đã xây dựng được một chương trình FORTRAN để tính năng lượng của exciton hai chiều trong từ trường khi có tính đến thế chắn Keldysh với độ chính xác tới 12 chữ số thập phân. Chương trình làm việc tốt với từ trường có cường độ từ 0 đến 20 a.u. và giá trị độ dài chắn từ 0 đến 50 cho trạng thái cơ bản và các trạng thái kích thích ns, n từ 0 đến 10.
* Áp dụng chương trình tính toán cho các mức năng lượng của exciton trong các đơn lớp TMD như WS2 và WSe2 đặt trong từ trường. Kết quả thu được phù hợp với các số liệu thực nghiệm mới nhất. Đồng thời cũng đưa ra được bộ số liệu lý thuyết để làm cơ sở phân tích các thực nghiệm mới. Cụ thể, đã phân tích ảnh hưởng của thế chắn làm tăng hiệu ứng từ trường trong đơn lớp TMD. Ngoài ra, đã trích xuất giá trị khối lượng hiệu dụng và độ dài chắn từ phổ thực nghiệm năng lượng exciton phù hợp với các số liệu thực nghiệm khác.
* Thu được biểu thức giải tích cho yếu tố ma trận của tương tác electron-electron làm cơ sở cho việc áp dụng phương pháp toán tử FK cho bài toán exciton âm hai chiều cũng như cho bài toán nguyên tử hai chiều nhiều electron.

**3. CÁC ỨNG DỤNG/ KHẢ NĂNG ỨNG DỤNG TRONG THỰC TIỄN HAY NHỮNG VẤN ĐỀ CÒN BỎ NGỎ CẦN TIẾP TỤC NGHIÊN CỨU**

Vấn đề nghiên cứu tiếp theo là áp dụng phương pháp toán tử FK để tính phổ năng lượng của exciton âm trong đơn lớp TMD đặt trong từ trường và sử dụng nó cho các phân tích số liệu thực nghiệm.

|  |  |
| --- | --- |
| **CÁN BỘ HƯỚNG DẪN**  **GS. TSKH. LÊ VĂN HOÀNG** | **NGHIÊN CỨU SINH**  **NGUYỄN PHƯƠNG DUY ANH** |

**XÁC NHẬN CỦA CƠ SỞ ĐÀO TẠO**

**PHÓ HIỆU TRƯỞNG**

**THESIS INFORMATION**

**Thesis title:** Energy spectra of exciton in two-dimensional semiconductor systems

**Speciality:** Theoretical physics and mathematical physics

**Code:** 62440101

**PhD Student:** Nguyen Phuong Duy Anh

**Academic year:** 22/2012

**Supervisor:** Prof. D.Sc. Le Van Hoang

**At:** University of Science – VNU.HCMC

**1. THESIS SUMMARY:**

In this thesis, we investigate the energy spectra of excitons in two-dimensional semiconductors in general and particularly in the monolayer transition metal dichalcogenides (TMDs) by the FK operator method. We use the Keldysh potential to describe the electron-hole interaction in the monolayer TMDs such as WS2, WSe2, and the obtained results for exciton energy are comparable with the newest experimental data. These highly accurate numerical solutions are used to analyze the influence of the screening on the magnetic effect. Besides, we propose a new method to find the exciton reduced mass and the screening length from the energy spectra of the exciton. Using the newest experimental exciton energy, we have predicted these structural parameters compared with the other experimental data.

**2. NEW RESULTS IN THESIS:**

The new results of the thesis are as follows:

- The explicit expressions of  are given for analytically describing the dependence of the energy of a two-dimensional exciton on magnetic field intensity for some states, such as , ,, , ,  with an error of less than 1% for the whole range of the magnetic field intensity. This method can be applied to any excited state.

- The FORTRAN code for solving the Schrödinger equation of a 2D screened exciton in a constant magnetic field with the precision of twelve decimal places. The working ranges of the code are from zero to γ=20 for the magnetic intensity, and from zero to α=50 for the screening length. The code can effectively calculate the ground and highly excited ns-states up to n=10.

- Applying the built code to calculate exciton energies for the monolayer TMDs WS2 and WSe2 in the magnetic field well compared with recent experimental data. Also giving new theoretical data for exciton energies which may use for experimental analyses. In concrete, having analyzed the screening, which strongly enhances the magnetic field effect in the TMDs. Notably, having predicted the screening length and the exciton reduced mass in the monolayers well compared with other experimental data.

- Having found the explicit expressions of matrix elements for the electron-hole interaction, which allows applying the FK operator method to the two-dimensional negatively charged exciton problem as well as to the multi-electron two-dimensional atomic problems.

**3. APPLICATIONS, PERSPECTIVES AND FUTURE RESULTS:**

The next problem is applying the FK operator method to calculate the energy spectrum of negatively charged excitons in the monolayer TMDs in a constant magnetic field and using it for experimental analyses.

|  |  |
| --- | --- |
| SUPERVISOR  Prof. D.Sc. Lê Văn Hoàng | PhD STUDENT  Nguyễn Phương Duy Anh |

CONFIRMATION OF THE UNIVERSITY OF SCIENCE

VICE PRESIDENT