PHƯƠNG PHÁP THỜI GIAN ẢO GIẢI SỐ PHƯƠNG TRÌNH SCHRÖDINGER DỪNG

ĐỖ THỊ THU HÀ*, LÊ THỊ THANH THỦY**,
TRẦN LAN PHƯƠNG**, NGUYỄN NGỌC TY***

TÓM TẮT

Bằng cách áp dụng phương pháp thời gian ảo cho một số dạng thế năng khác nhau như dao động tử điều hòa và phi điều hòa, chúng tôi đã thu được năng lượng và hàm sóng của phương trình Schrödinger dừng. Việc so sánh kết quả với phương pháp lí thuyết nhiễu loạn và phương pháp toán tử đã cho phép chúng tôi kết luận phương pháp thời gian ảo rất hiệu quả, cho kết quả chính xác cho việc giải số phương trình Schrödinger dừng.

Từ khóa: phương pháp thời gian ảo, phương trình Schrödinger, giải số.

ABSTRACT

Imaginar time method for numerical solution of Schrödinger equation

By applying the imaginary time method for some different forms of potential energy, say harmonic and anharmonic oscillation, we obtain the energy levels of Schrödinger equation. Comparison with the perturbation theory and the operator method leads us to conclude that the imaginary time method gives exact solution solutions for Schrödinger equation.

Keywords: imaginary time method, Schrödinger equation, numerical solution.

1. Giới thiệu

Trong cơ học lượng tử, phương trình Schrödinger đóng vai trò quan trọng tương đương phương trình động lực học của định luật II Newton của cơ học cổ điển. Việc giải phương trình Schrödinger dừng cho chúng ta bức tranh chung về phổ năng lượng của hệ đang xét. Đây chính là cơ sở cho việc tìm ra các tính chất mới, chỉ biểu hiện trong thế giới lượng tử với kích thước vi mô. Hơn nữa, đối với các bài toán hệ tương tác với trường bên ngoài thay đổi theo thời gian, việc xác định các trạng thái của hệ khi chưa tương tác (xem như điều kiện ban đầu) đóng vai trò quyết định. Chính vì vậy, việc giải chính xác phương trình Schrödinger dừng có ý nghĩa đặc biệt trong vật lí.

Tuy nhiên, việc giải chính xác nghiệm giải tích phương trình Schrödinger dừng chỉ có thể tiến hành với một số ít trường hợp cụ thể như bài toán hố thế, dao động tử điều hòa, nguyên tử hydro. Với các trường hợp khác chúng ta cần sử dụng các phương pháp gần đúng như phương pháp biến phân, phương pháp nhiễu loạn. Việc sử dụng các phương pháp gần đúng này, như phương pháp nhiễu loạn cũng rất hạn chế và chỉ áp dụng được khi thế năng nhiễu loạn rất nhỏ so với năng lượng của hệ khi

* HVCH, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG TPHCM
** Sinh viên, Trường Đại học Sư phạm TPHCM
*** TS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

chưa có nhiễu loạn. Chính vì vậy, việc phát triển các phương pháp số giúp giải chính xác các phương trình Schrödinger dừng rất được quan tâm và phát triển rộng rãi.

Một trong các phương pháp giải số được áp dụng rộng rãi gần đây là phương pháp thời gian ảo [3-5]. Trong công trình [3], các tác giả đã giới thiệu về phương pháp thời gian ảo và đã kiểm chứng cho một số bài toán dừng có dạng thế năng đơn giản. Tiếp sau đó, phương pháp này được ứng dụng rộng rãi cho các bài toán nguyên tử và phân tử khi tương tác với trường lade [4-6]. Trong các công trình này, các tác giả đều sử dụng phương pháp thời gian ảo để giải phương trình Schrödinger dừng cho hệ nguyên tử, phân tử cho một hoặc hai điện tử, trước khi xét đến quá trình tương tác với trường ngoài. Các tác giả đều nhận định việc áp dụng phương pháp này đều cho kết quả năng lượng chính xác.

Trong bài báo này, chúng tôi sẽ giới thiệu phương pháp thời gian ảo và giải số cho một số bài toán có dạng thế năng của dao động tử điều hòa và phi điều hòa. Ngoài ra, chúng tôi cũng giải các bài toán này bằng phương pháp nhiễu loạn và phương pháp toán tử [1, 2]. Việc so sánh các phương pháp đã cho phép chúng tôi kết luận phương pháp thời gian ảo giúp cho việc giải số phương trình Schrödinger dừng hiệu quả và cho kết quả chính xác.

Bố cục bài báo được chia làm ba phần chính. Phần 2 dưới đây, chúng tôi sẽ mô tả về phương pháp tính thời gian ảo và quy trình tính toán để giải ra các mức năng lượng của các trạng thái liên kết. Sau đó, trong phần 3, chúng tôi sẽ trình bày các kết quả cho một số dạng thế năng cho phương trình Schrödinger và chúng tôi cũng trình bày kết quả bài toán theo hướng tiếp cận gần đúng với lí thuyết nhiễu loạn và theo hướng tiếp cận của phương pháp toán tử; cuối cùng, chúng tôi tóm tắt lại các kết quả về việc giải số phương trình Schrödinger dừng bằng phương pháp thời gian ảo.

2. Phương pháp thời gian ảo

Phương pháp thời gian ảo xuất phát từ phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian được mô tả bởi phương trình

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \tag{1}$$

trong đó $\hat{H}$ là toán tử Hamilton, Ψ là hàm sóng. Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng hệ đơn vị nguyên tử $\hbar = e = m_e = 1$.

Điểm mấu chốt của phương pháp thời gian ảo là phép đổi biến số $\tau = it$ trong phương trình (1). Với phép biến đổi này, phương trình (1) được được viết lại

$$\frac{\partial \Psi(\tau)}{\partial \tau} = -\hat{H}\Psi(\tau). \tag{2}$$

Nghiệm phương trình (2) có thể được viết dưới dạng

$$\Psi(\tau) = e^{-\hat{H}\tau}\Psi(0), \tag{3}$$

trong đó $\Psi(0)$ là hàm sóng lúc đầu $\tau = 0$. Gọi ψ_n là hệ hàm riêng của phương trình Schrödinger dừng cần giải

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n, \tag{4}$$

với E_n là các mức năng lượng riêng của toán tử Hamilton.

Khai triển $\Psi(0)$ theo tổ hợp tuyến tính của hệ hàm đầy đủ ψ_n, $\Psi(0)=\sum C_n\psi_n$ và thay vào phương trình (3), ta được

$$\Psi(\tau)=\sum C_n e^{-E_n\tau}\psi_n, \qquad (5)$$

trong đó phương trình (4) đã được sử dụng. Để ý thấy rằng dù hàm sóng ban đầu $\Psi(0)$ đã được chuẩn hóa thì sau thời gian τ, tính chuẩn hóa này sẽ giảm đi do sự xuất hiện của các thừa số $e^{-E_n\tau}$. Hàm sóng ở (5) sau khi được chuẩn hóa được viết lại như sau

$$\Psi(\tau)=\frac{\psi_0+\sum_{n\neq 0}\left(\frac{C_n}{C_0}\right)e^{-(E_n-E_0)\tau}}{\sqrt{1+\sum_{n\neq 0}\left(\frac{C_n}{C_0}\right)^2 e^{-2(E_n-E_0)\tau}}}. \qquad (6)$$

với ψ_0, E_0 lần lượt là hàm sóng và năng lượng của trạng thái cơ bản trong phương trình (4). Vì $E_n-E_0>0$ nên $e^{-(E_n-E_0)\tau}\to 0$ khi $\tau\to\infty$, khi đó $\Psi(\tau\to\infty)=\psi_0$.

Vì vậy để giải phương trình (4), ta xuất phát từ một trạng thái ban đầu bất kì $\Psi(0)$ và tác dụng số hạng $e^{-\hat{H}t}$ và cho $\tau\to\infty$, ta sẽ thu được hàm sóng và mức năng lượng của trạng thái cơ bản.

Để thu được các trạng thái kích thích thứ nhất, ta cũng tiến hành tương tự. Tuy nhiên ta cần phải loại bỏ đi trạng thái cơ bản trong biểu thức (3), khi đó trạng thái có năng lượng thấp nhất chính là trạng thái kích thích thứ nhất. Quy trình tìm trạng thái kích thích thứ nhất bắt đầu biểu thức

$$\Psi(\tau)=(1-P_0)e^{-\hat{H}t}\Psi(0), \qquad (7)$$

Với $P_0=|\psi_0\rangle\langle\psi_0|$ chính là mật độ của trạng thái cơ bản trong không gian Hilbert. Tương tự cho các trạng thái cao hơn, ta trừ đi các trạng thái cơ bản, kích thích thứ nhất,… kích thích thứ (n-1) thì sẽ thu được hàm sóng và năng lượng cho trạng thái thứ n, khi đó

$$\Psi(\tau)=(1-P_0-P_1...-P_{n-1})e^{-\hat{H}t}\Psi(0), \qquad (8)$$

với $P_n=|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ là mật độ của trạng thái thứ n.

3. Kết quả

Trong phần này, chúng tôi sẽ trình bày kết quả áp dụng phương pháp thời gian ảo để giải phương trình Schrödinger dừng với các dạng thế khác nhau bao gồm thế của dao động tử điều hòa và dao động tử phi điều hòa. Chúng tôi giới hạn chỉ xét các bài toán trong không gian một chiều.

3.1. Dao động tử điều hòa

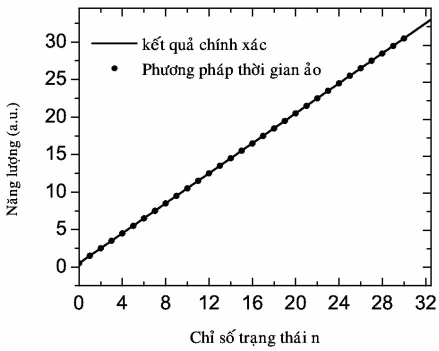
Thế năng của dao động tử điều hòa có dạng

$$V=\frac{1}{2}\omega^2x^2, \qquad (9)$$

và các mức năng lượng được giải ra chính xác là

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega. \qquad (10)$$

Kết quả áp dụng phương pháp thời gian ảo được chúng tôi thể hiện trong hình 1 và so sánh với kết quả chính xác.



Hình 1. *Năng lượng của dao động tử điều hòa với $\omega = 1$ cho các mức năng lượng từ cơ bản đến kích thích thứ 30. Đường liền nét là kết quả tính toán chính xác.Chấm tròn là kết quả tính toán bằng phương pháp thời gian ảo*

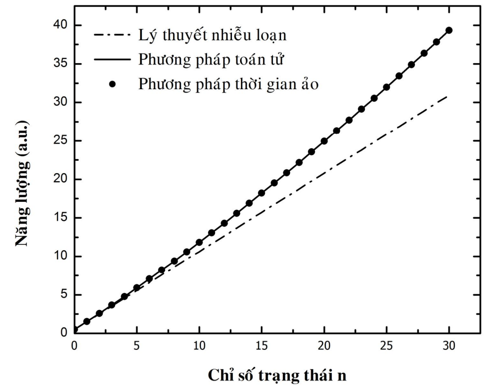
Kết quả tính toán năng lượng cho dao động tử của chúng tôi cho thấy có sự phù hợp với kết quả tính toán chính xác. Kết quả hiện tại của chúng tôi chính xác đến 8 chữ số sau dấu phẩy và độ chính xác này hoàn toàn có thể tăng lên.

Chúng tôi tiếp tục tính toán cho các trường hợp dao động tử điều hòa với các tần số ω khác nhau. Tính toán cho thấy phương pháp thời gian vẫn cho kết quả bằng số chính xác tới 8 chữ số sau dấy phẩy.

3.2. Dao động tử phi điều hòa

Trong phần này, chúng tôi tiếp tục áp dụng phương pháp thời gian ảo để giải các bài toán dao động tử phi điều hòa. Trong phần này chúng tôi xét số hạng phi điều hòa là λx^4. Với dạng thế phi điều hòa này, ngoài sử dụng phương pháp thời gian ảo, chúng tôi đều tính toán các mức năng lượng theo hướng tiếp cận của lí thuyết nhiễu loạn. Ngoài ra, chúng tôi còn tính toán thêm với phương pháp toán tử để có kết quả so sánh.

Trong hình 2, chúng tôi trình bày kết quả tính các mức năng lượng cho dao động tử phi điều hòa với số hạng phi điều hòa λx^4 ứng với $\lambda = 0.01$.



Hình 2. *Năng lượng của dao động tử phi điều hòa với $\lambda = 0.01$*

Đường liền nét là kết quả phương pháp toán tử, đường đứt nét là kết quả phương pháp nhiễu loạn, và chấm tròn là kết quả phương pháp thời gian ảo.

Trong hình 2, ứng với các mức năng lượng thấp $n < 4$, ba hướng tiếp cận đều cho kết quả trùng nhau. Tuy nhiên, với các mức năng lượng cao hơn thì hai phương pháp toán tử và phương pháp thời gian ảo cho cùng kết quả. Trong khi đó, phương pháp lí thuyết nhiễu loạn lại cho kết quả sai lệch.

Với những giá trị λ lớn hơn, kết quả vẫn cho thấy có sự trùng khớp giữa hai phương pháp toán tử và thời gian ảo và sự sai lệch của phương pháp lí thuyết nhiễu loạn. Ứng với giá trị λ càng lớn thì phần trùng hợp giữa phương pháp nhiễu loạn và hai phương pháp kia càng ít. Điều này là do khi λ càng lớn thì miền áp dụng cho các trạng thái càng hẹp. Điều kiện này thể hiện qua mối liên hệ giữa λ và n sau [6]

$$\lambda = \frac{2(2n+1)}{6n^2+6n+3}. \qquad (11)$$

Ứng với $\lambda = 0.01$, ta có thể tính ra giới hạn của chỉ số trạng thái $n = 4$. Điều này đã được thể hiện trong hình 2. Chính vì vậy ta thấy rằng với bài toán dao động tử phi điều hòa, khi λ lớn, phương pháp thời gian ảo vẫn cho kết quả chính xác khi so sánh với phương pháp toán tử, trong khi lí thuyết nhiễu loạn lại thể hiện những hạn chế khi tính toán năng lượng của hệ.

4. Kết luận

Chúng tôi đã áp dụng phương pháp thời gian ảo để khảo sát các bài toán dao động tử điều hòa và dao động tử phi điều hòa. Đối với dao động tử điều hòa, bài toán có kết quả chính xác bằng phương pháp giải tích, phương pháp thời gian ảo cho kết quả chính xác đến tám chữ số sau dấu phẩy. Đối với dao động tử phi điều hòa, phương pháp thời gian ảo đã tiếp tục thể hiện ưu điểm khi cho kết quả chính xác, phù hợp với phương pháp toán tử, trong khi đó phương pháp nhiễu loạn lại thể hiện kết quả kém chính xác. Với các kết quả đó, phương pháp thời gian ảo cho thấy là một phương pháp giải số phương trình Schrödinger dừng hiệu quả, chính xác.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Hoàng Đỗ Ngọc Trầm, Lê Văn Hoàng (2012), "Tham số tự do với sự hội tụ của phương pháp toán tử FK", *Tạp chí Khoa học ĐHSP TPHCM*, 33 (67), tr. 94-106.
2. Feranchuk I. D. and Komarov L. I. (1982), "The Operator Method of Approximate Solution of the Schrödinger Equation", *Phys. Lett. A*, 88, pp. 212-214.
3. Kosloff R. (1986), "A direct relaxation method for calculating eigenfunctions and eigenvalues of the Schrödinger equation on a grid", *Chemical Physics Letters*, 127, pp. 223-230.
4. Lappas D.G. and Marangos J.P. (2000), "Orientation dependence of high-order harmonic generation in hydrogen molecular ions", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 33, pp. 4679-4689.
5. Lein M., Hay N., Velotta R., Marangos J. P., and Knight P. L. (2002), "Role of the Intramolecular Phase in High-Harmonic Generation", *Phys. Rev. Lett.*, 88, 183903.3
6. Takemoto Norio and Becker Andreas (2011), "Time-resolved view on charge-resonance-enhanced ionization", *Phys. Rev. A*, 84, 023401.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 11-01-2013; ngày phản biện đánh giá: 28-01-2013; ngày chấp nhận đăng: 18-02-2013)