TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM TP HỒ CHÍ MINH
TẠP CHÍ KHOA HỌC
ISSN: 1859-3100
KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ CÔNG NGHỆ
Tập 15, Số 9 (2018): 12-21

HO CHI MINH CITY UNIVERSITY OF EDUCATION
JOURNAL OF SCIENCE
NATURAL SCIENCES AND TECHNOLOGY
Vol. 15, No. 9 (2018): 12-21

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

PHƯƠNG PHÁP ĐẠI SỐ CHO NGUYÊN TỬ HELI

Cao Hồ Thanh Xuân[1*], Lý Duy Nhất[2], Hoàng Đỗ Ngọc Trầm[2]

[1] *Phòng Đào tạo và Quản lí Nghiên cứu khoa học - Trường Cao đẳng Nông nghiệp Nam Bộ*

[2] *Khoa Vật lí - Trường Đại học Sư phạm TP Hồ Chí Minh*

Ngày nhận bài: 18-6-2018; ngày nhận bài sửa: 15-8-2018; ngày duyệt đăng: 21-9-2018

TÓM TẮT

Hamiltonian của nguyên tử heli được biểu diễn dưới dạng đại số thông qua các toán tử sinh hủy lượng tử, cho phép ứng dụng phương pháp đại số để giải bài toán. Ở đây, bộ hàm cơ sở của bài toán được viết dưới dạng bộ hàm sóng của hai dao động tử điều hòa bốn chiều rất thuận tiện cho tính toán, đồng thời vẫn mang các đặc điểm của hàm sóng bài toán tương tác Coulomb. Bộ hàm này được dùng một cách hiệu quả để giải bài toán nguyên tử đang xét và mở rộng cho các hệ nguyên tử khác phức tạp hơn, ví dụ như bài toán nguyên tử heli trong từ trường.

Từ khóa: phương pháp đại số, hệ nguyên tử ba chiều, toán tử sinh hủy, bộ hàm cơ sở.

ABSTRACT

Algebraic method for helium atom

The Hamiltonian for a helium atom is represented in the algebraic form via the quantum annihilation and creation operators, thus the algebraic methods can be used to solve the problem. Here, a basic set in the algebraic form given as a set of eight-dimentional harmonic oscillator wave functions is useful for calculating, and, from other side, characterizes the Coulomb interaction wave functions, that makes the considered problem very effective to solve. This method can be developed for other more complex atomic systems such as a helium atom in a magnetic field.

Keywords: algebraic method, three-dimensional atomic systems, annihilation and creation operators, basic set.

1. Mở đầu

Tính toán phổ năng lượng của nguyên tử heli là một trong những bài toán quan trọng được nghiên cứu từ những ngày đầu của cơ học lượng tử. Gần đây, do có liên quan đến việc nghiên cứu phổ của các sao lùn trắng và sao nơtron trong vật lí thiên văn, bài toán nguyên tử heli trong từ trường tiếp tục được quan tâm nghiên cứu trong cả thực nghiệm lẫn lí thuyết (xem [1] và các trích dẫn trong đó). Việc giải phương trình Schrödinger cho nguyên tử heli đã được tiến hành bằng nhiều phương pháp gần đúng khác nhau. Trong công trình này, chúng tôi xét xây dựng phương pháp đại số giải phương trình Schrödinger

Email: *xuancdnb@sac.edu.vn*

không những cho bài toán nguyên tử heli mà có thể áp dụng cho các bài toán phức tạp hơn như bài toán nguyên tử heli trong từ trường và một số bài toán khác.

Trong một công trình trước đây của nhóm, chúng tôi đã sử dụng phép biến đổi Kustaanheimo – Stiefel để chuyển bài toán nguyên tử hydro trong từ trường sang bài toán dao động tử phi điều hòa bốn chiều, kết hợp với phương pháp toán tử FK [2,3] để giải số phương trình Schrödinger cho hệ này [4]. Việc sử dụng phương pháp đại số này giúp tiết kiệm đáng kể tài nguyên tính toán do sử dụng bộ hàm cơ sở rất đặc biệt, vừa vẫn giữ tính chất của bộ hàm cho tương tác Coulomb vừa có dạng của hàm sóng dao động tử điều hòa rất thuận tiện trong tính toán. Do vậy, phát triển tiếp phương pháp đại số tính toán đã được trình bày trong công trình [4] cho nguyên tử heli, một hệ phức tạp hơn, là điều cần thiết.

Vấn đề khó nhất khi sử dụng phương pháp đại số cho bài toán nguyên tử là thành phần tương tác Coulomb có các tọa độ nằm ở mẫu số nên không thể dùng các hệ thức giao hoán của các toán tử sinh hủy trong tính toán các yếu tố ma trận của bài toán. Khó khăn này đã được giải quyết trong công trình [4] bằng cách sử dụng phép biến đổi Kustaanheimo – Stiefel để đưa thành phần tương tác Coulomb về dạng đa thức. Với bài toán nguyên tử heli, do có thêm thành phần tương tác electron-electron không thể đa thức hóa bằng phép biến đổi Kustaanheimo – Stiefel, nên chúng tôi sử dụng thêm phép biến đổi Fourier nâng thành phần tọa độ ở mẫu số lên tử số, thông qua biểu diễn của hàm mũ, trước khi vận dụng các biểu diễn đại số cho thành phần tương tác electron-electron của bài toán.

Sau khi viết lại phương trình Schrödinger cho nguyên tử heli dưới dạng biểu diễn đại số, chúng tôi xây dựng bộ hàm sóng cơ sở cho bài toán. Bộ hàm cơ sở cần xây dựng phải đủ đơn giản để áp dụng được các phương pháp tính số phù hợp cho bài toán. Mặt khác bộ hàm cơ sở được chọn phải thể hiện được tính chất vật lí của hệ tương tác Coulomb nhằm thu được tốc độ hội tụ cao khi tính số. Trong công trình này, bộ hàm cơ sở được xây dựng dựa trên nền tảng là bộ hàm cơ sở cho hệ một hạt được nêu trong công trình [4], là sự kết hợp từ bộ hàm cơ sở của hai dao động tử điều hòa bốn chiều tương ứng. Tham số tự do ω được đưa vào cho phép tùy biến bộ hàm cơ sở để phù hợp với các bài toán khác nhau.

2. Mô hình dao động tử điều hòa cho bài toán nguyên tử heli

Phương trình Schrödinger không thứ nguyên cho nguyên tử heli, mô tả chuyển động của hai electron trong trường thế Coulomb, có dạng như sau:

$$
\begin{aligned}
&(\hat{H}-E)\Psi(x_1,y_1,z_1;x_2,y_2,z_2)=0,\\
&\hat{H}=-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_1^2}\right)-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_2^2}\right)\\
&\qquad-\frac{Z}{\sqrt{x_1^2+y_1^2+z_1^2}}-\frac{Z}{\sqrt{x_1^2+y_1^2+z_1^2}}+\frac{1}{\sqrt{(x_1-x_2)^2+(y_1-y_2)^2+(z_1-z_2)^2}},
\end{aligned}
\tag{1}
$$

trong đó: đơn vị độ dài là bán kính Bohr $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2 / me^2 = 0{,}529\,\overset{0}{\mathrm{A}}$; đơn vị năng lượng là hai lần hằng số Rydberg $R_y = \hbar^2 / 2ma_0^2 = 13{,}61\mathrm{eV}$; Z là điện tích hạt nhân của nguyên tử heli, trong công trình này $Z = 2$.

Sử dụng phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel:

$$\begin{cases} x_1 = 2(u_1u_2 + v_1v_2) \\ y_1 = 2(u_1v_2 - u_2v_1) \\ z_1 = u_1^2 - u_2^2 + v_1^2 - v_2^2 \end{cases}, \qquad \begin{cases} x_2 = 2(u_3u_4 + v_3v_4) \\ y_2 = 2(u_3v_4 - u_4v_3) \\ z_2 = u_3^2 - u_4^2 + v_3^2 - v_4^2 \end{cases}, \tag{2}$$

để chuyển phương trình của hệ hai hạt trong không gian ba chiều (x_1, y_1, z_1) và (x_2, y_2, z_2) sang một phương trình khác trong không gian tám chiều (u, v). Tương ứng với sự thay đổi số chiều của không gian khi thực hiện phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel, bộ hàm sóng trong không gian mới (u, v) phải thỏa mãn điều kiện như sau:

$$\begin{aligned} &\left(u_1\frac{\partial}{\partial v_1} - v_1\frac{\partial}{\partial u_1} + u_2\frac{\partial}{\partial v_2} - v_2\frac{\partial}{\partial u_2}\right)\psi_1(u_1, u_2, v_1, v_2) = 0, \\ &\left(u_3\frac{\partial}{\partial v_3} - v_3\frac{\partial}{\partial u_3} + u_4\frac{\partial}{\partial v_4} - v_4\frac{\partial}{\partial u_4}\right)\psi_2(u_3, u_4, v_3, v_4) = 0. \end{aligned} \tag{3}$$

Từ phép biến đổi (2), chúng tôi thu được:

$$\begin{cases} dx_1dy_1dz_1 = 16(u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2)du_1dv_1du_2dv_2,\ r_1 = \sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2} = u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2, \\ dx_2dy_2dz_2 = 16(u_3^2 + v_3^2 + u_4^2 + v_4^2)du_3dv_3du_4dv_4,\ r_2 = \sqrt{x_2^2 + y_2^2 + z_2^2} = u_3^2 + v_3^2 + u_4^2 + v_4^2. \end{cases} \tag{4}$$

Phương trình (1) được viết trong không gian (u_s, v_s) như sau:

$$\hat{\tilde{H}}\Psi(u_1, v_1, u_2, v_2, u_3, v_3, u_4, v_4) = 0, \tag{5}$$

với $\hat{\tilde{H}} = r_1r_2\left(\hat{H} - E\right)$ có dạng tường minh trong không gian (u, v) như sau:

$$\begin{aligned} \hat{\tilde{H}} = &(u_3^2+v_3^2+u_4^2+v_4^2)\left[-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial v_1^2}\right)-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial v_2^2}\right)-\frac{E}{2}(u_1^2+v_1^2+u_2^2+v_2^2)-Z\right] \\ &+(u_1^2+v_1^2+u_2^2+v_2^2)\left[-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_3^2}+\frac{\partial^2}{\partial v_3^2}\right)-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_4^2}+\frac{\partial^2}{\partial v_4^2}\right)-\frac{E}{2}(u_3^2+v_3^2+u_4^2+v_4^2)-Z\right] \\ &+\hat{H}_C(u_1,u_2,u_3,u_4,v_1,v_2,v_3,v_4). \end{aligned} \tag{6}$$

Hai phương trình (1) và (5) là hoàn toàn tương đương nhau về mặt toán học, tuy nhiên phương trình (5) đơn giản hơn về mặt cấu trúc do các thành phần chính có dạng các đa thức theo các biến số động học, nên trong tính toán có thể dùng bộ hàm cơ sở của dao động tử điều hòa. Số hạng cuối trong Hamiltonian (6) là thành phần tương tác electron-

electron, có chứa các biến số động học ở mẫu số, nhưng vẫn có thể sử dụng các tính toán đại số sau khi biến đổi Fourier như sau:

$$\hat{H}_C = \frac{\left(u_1^2+v_1^2+u_2^2+v_2^2\right)\left(u_3^2+v_3^2+u_4^2+v_4^2\right)}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} dt_1\, dt_2 dt_3 \frac{1}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^3}} \tag{7}$$

$$\times e^{2i(u_1u_2+v_1v_2)t_1+2i(u_1v_2-u_2v_1)t_2+i(u_1^2-u_2^2+v_1^2-v_2^2)t_3} e^{-2i(u_3u_4+v_3v_4)t_1-2i(u_3v_4-u_4v_3)t_2-i(u_3^2-u_4^2+v_3^2-v_4^2)t_3}.$$

Ngoài ra, chúng tôi nhận thấy rằng bài toán đang xét bảo toàn moment động lượng theo trục Oz do toán tử:

$$\hat{L}_z = \hat{L}_{1z} + \hat{L}_{2z} = -i\left(x_1\frac{\partial}{\partial y_1} - y_1\frac{\partial}{\partial x_1}\right) - i\left(x_2\frac{\partial}{\partial y_2} - y_2\frac{\partial}{\partial x_2}\right), \tag{8}$$

giao hoán với Hamiltonian. Để sử dụng trong các tính toán, chúng tôi viết toán tử (8) trong không gian (u_s, v_s) như sau:

$$\hat{L}_z = -\frac{i}{2}\left(v_1\frac{\partial}{\partial u_1} - u_1\frac{\partial}{\partial v_1} + u_2\frac{\partial}{\partial v_2} - v_2\frac{\partial}{\partial u_2}\right) - \frac{i}{2}\left(v_3\frac{\partial}{\partial u_3} - u_3\frac{\partial}{\partial v_3} + u_4\frac{\partial}{\partial v_4} - v_4\frac{\partial}{\partial u_4}\right). \tag{9}$$

3. Biểu diễn đại số qua các toán tử sinh hủy

Các toán tử sinh hủy được định nghĩa như sau:

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_s = \sqrt{\dfrac{\omega}{2}}\left(\hat{u}_s + \dfrac{1}{\omega}\dfrac{\partial}{\partial \hat{u}_s}\right),\ \hat{\alpha}_s^+ = \sqrt{\dfrac{\omega}{2}}\left(\hat{u}_s - \dfrac{1}{\omega}\dfrac{\partial}{\partial \hat{u}_s}\right), \\ \hat{\beta}_s = \sqrt{\dfrac{\omega}{2}}\left(\hat{v}_s + \dfrac{1}{\omega}\dfrac{\partial}{\partial \hat{v}_s}\right),\ \hat{\beta}_s^+ = \sqrt{\dfrac{\omega}{2}}\left(\hat{v}_s - \dfrac{1}{\omega}\dfrac{\partial}{\partial \hat{v}_s}\right), \end{cases} \tag{10}$$

trong đó, ω là tham số tự do; $s = 1,2,3,4$. Các toán tử (10) thỏa mãn các giao hoán tử sau:

$$\left[\hat{\alpha}_s(\omega), \hat{\alpha}_t^+(\omega)\right] = \delta_{st},\ \left[\hat{\beta}_s(\omega), \hat{\beta}_t^+(\omega)\right] = \delta_{st}, \tag{11}$$

Bài toán đang xét có bảo toàn mô-men động lượng theo trục Oz nên bộ hàm cơ sở được sử dụng là nghiệm riêng của toán tử $\hat{L}_z$. Để thu được toán tử $\hat{L}_z$ có dạng trung hòa; chúng tôi sử dụng phép biến đổi chính tắc sau để định nghĩa các toán tử sinh hủy mới:

$$\begin{cases} \hat{a}_s^+ = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\alpha}_s^+ + i\hat{\beta}_s^+\right),\ \hat{a}_s = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\alpha}_s - i\hat{\beta}_s\right), \\ \hat{b}_s^+ = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\alpha}_s^+ - i\hat{\beta}_s^+\right),\ \hat{b}_s = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\alpha}_s + i\hat{\beta}_s\right). \end{cases} \tag{12}$$

Các toán tử $\hat{a}_s, \hat{a}_s^+, \hat{b}_s, \hat{b}_s^+$ $(s = 1,2,3,4)$ giữ nguyên các tính chất của các toán tử sinh hủy, và thỏa mãn các giao hoán tử sau:

$$\left[\hat{a}_s, \hat{a}_t^+\right] = \delta_{st},\quad \left[\hat{b}_s, \hat{b}_t^+\right] = \delta_{st}. \tag{13}$$

Toán tử $\hat{L}_z$ qua biểu diễn đại số (12) có dạng trung hòa như sau:

$$\hat{L}_z = \frac{1}{2}\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 - \hat{a}_2^+\hat{a}_2 - \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{a}_3^+\hat{a}_3 - \hat{a}_4^+\hat{a}_4 - \hat{b}_3^+\hat{b}_3 + \hat{b}_4^+\hat{b}_4\right). \tag{14}$$

Ngoài ra, Hamiltonian có thể biểu diễn đại số qua các toán tử sinh hủy (12). Để minh họa, một số thành phần trong Hamiltonian được biểu diễn như sau:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial \hat{u}_s^2} + \frac{\partial^2}{\partial \hat{v}_s^2} = \omega\left(\hat{a}_s\hat{b}_s + \hat{a}_s^+\hat{b}_s^+ - \hat{a}_s^+\hat{a}_s - \hat{b}_s^+\hat{b}_s - 1\right),\\
&\hat{u}_s^2 + \hat{v}_s^2 = \frac{1}{\omega}\left(\hat{a}_s\hat{b}_s + \hat{a}_s^+\hat{b}_s^+ + \hat{a}_s^+\hat{a}_s + \hat{b}_s^+\hat{b}_s + 1\right),\\
&\hat{u}_s\hat{u}_t = \frac{1}{4\omega}\left(\hat{a}_s + \hat{a}_s^+ + \hat{b}_s + \hat{b}_s^+\right)\left(\hat{a}_t + \hat{a}_t^+ + \hat{b}_t + \hat{b}_t^+\right),\\
&\hat{v}_s\hat{v}_t = -\frac{1}{4\omega}\left(-\hat{a}_s + \hat{a}_s^+ + \hat{b}_s - \hat{b}_s^+\right)\left(-\hat{a}_t + \hat{a}_t^+ + \hat{b}_t - \hat{b}_t^+\right),\\
&\hat{u}_s\hat{v}_t = \frac{1}{4i\omega}\left(\hat{a}_s + \hat{a}_s^+ + \hat{b}_s + \hat{b}_s^+\right)\left(-\hat{a}_t + \hat{a}_t^+ + \hat{b}_t - \hat{b}_t^+\right), \quad s,\, t = 1,2,3,4,\, (s \neq t).
\end{aligned} \tag{15}$$

Khi viết Hamiltonian của bài toán dưới dạng đại số, chúng tôi nhận thấy phần lớn các toán tử trong biểu thức của Hamiltonian đều nằm dưới dạng đa thức của các toán tử sinh hủy, tuy nhiên còn có các toán tử trong thành phần của toán tử (7) có dạng hàm e mũ:

$$\hat{O}_1(t) = e^{2i(u_1u_2+v_1v_2)t_1 + 2i(u_1v_2-u_2v_1)t_2 + i(u_1^2-u_2^2+v_1^2-v_2^2)t_3}, \tag{16}$$

$$\hat{O}_2(t) = e^{-2i(u_3u_4+v_3v_4)t_1 - 2i(u_3v_4-u_4v_3)t_2 - i(u_3^2-u_4^2+v_3^2-v_4^2)t_3}, \tag{17}$$

Các toán tử này có thể biểu diễn qua toán tử sinh hủy và đưa về dạng chuẩn thuận tiện cho tính toán đại số như trình bày trong Phụ lục.

4. Bộ hàm cơ sở dạng đại số

Trong phần này, chúng tôi xây dựng bộ hàm cơ sở dạng đại số. Bộ hàm cơ sở này là hàm sóng riêng của hệ hai dao động tử điều hòa bốn chiều (tám bậc tự do). Đồng thời, bộ hàm cơ sở này là hàm sóng riêng của toán tử $\hat{L}_z$. Bộ hàm cơ sở thỏa mãn hai điều kiện trên có dạng:

$$\begin{aligned}
\left| j_1 j_2 j_3 j_4 j_5 j_6 j_7 j_8(\omega)\right\rangle = &\frac{1}{\sqrt{j_1!\,j_2!\,j_3!\,j_4!\,j_5!\,j_6!\,j_7!\,j_8!}}\left(\hat{a}_1^+\right)^{j_1}\left(\hat{b}_1^+\right)^{j_2}\left(\hat{a}_2^+\right)^{j_3}\left(\hat{b}_2^+\right)^{j_4}\\
&\times\left(\hat{a}_3^+\right)^{j_5}\left(\hat{b}_3^+\right)^{j_6}\left(\hat{a}_4^+\right)^{j_7}\left(\hat{b}_4^+\right)^{j_8}\left|0(\omega)\right\rangle,
\end{aligned} \tag{18}$$

với $j_1, j_2, j_3, j_4, j_5, j_6, j_7, j_8$ là các số nguyên không âm; trạng thái chân không được định nghĩa như sau:

$$\hat{a}_i\left|0(\omega)\right\rangle = 0, \quad \hat{b}_i\left|0(\omega)\right\rangle = 0, \quad \left\langle 0(\omega)\middle|0(\omega)\right\rangle = 1, \qquad (i = 1,2,3,4). \tag{19}$$

Chú ý rằng trong bộ hàm cơ sở (18), các chỉ số j_1, j_2, j_3, j_4 liên quan đến electron một trong khi j_5, j_6, j_7, j_8 liên quan đến electron hai trong nguyên tử heli. Theo nguyên lí không phân biệt hạt đồng nhất, chúng tôi sẽ đối xứng hóa bộ hàm sóng cơ sở theo hai electron sau khi đã xây dựng xong. Nhằm thuận tiện cho tính toán, chúng tôi viết bộ hàm cơ sở dưới dạng tích hai hàm sóng cho mỗi hạt electron:

$$|\, j_1 j_2 j_3 j_4 j_5 j_6 j_7 j_8(\omega)\rangle = |\, j_1 j_2 j_3 j_4(\omega)\rangle |\, j_5 j_6 j_7 j_8(\omega)\rangle . \tag{20}$$

Để bộ hàm cơ sở (18) sử dụng được cho bài toán heli, chúng tôi cần đòi hỏi nó là nghiệm riêng của các toán tử:

$$\hat{Q}_1 = \left(u_1 \frac{\partial}{\partial v_1} - v_1 \frac{\partial}{\partial u_1} + u_2 \frac{\partial}{\partial v_2} - v_2 \frac{\partial}{\partial u_2} \right) = -i\left(\hat{a}_1^+ \hat{a}_1 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 - \hat{b}_1^+ \hat{b}_1 - \hat{b}_2^+ \hat{b}_2 \right),$$

$$\hat{Q}_2 = \left(u_3 \frac{\partial}{\partial v_3} - v_3 \frac{\partial}{\partial u_3} + u_4 \frac{\partial}{\partial v_4} - v_4 \frac{\partial}{\partial u_4} \right) = -i\left(\hat{a}_3^+ \hat{a}_3 + \hat{a}_4^+ \hat{a}_4 - \hat{b}_3^+ \hat{b}_3 - \hat{b}_4^+ \hat{b}_4 \right),$$

với trị riêng bằng không. Từ đây, chúng tôi có được các hệ thức:

$$j_1 + j_3 = j_2 + j_4 ,\ \ j_5 + j_7 = j_6 + j_8 . \tag{21}$$

Như vậy, từ 8 chỉ số lượng tử cho bộ hàm cơ sở dao động tử điều hòa (18), chúng tôi chỉ cón 6 chỉ số lượng tử cho bộ hàm cơ sở cho bài toán heli.

Toán tử $\hat{L}_z$ có biểu thức:

$$\hat{L}_z = \hat{L}_{1z} + \hat{L}_{2z} = \frac{1}{2}\left(\hat{a}_1^+ \hat{a}_1 - \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 - \hat{b}_1^+ \hat{b}_1 + \hat{b}_2^+ \hat{b}_2 \right) + \frac{1}{2}\left(\hat{a}_3^+ \hat{a}_3 - \hat{a}_4^+ \hat{a}_4 - \hat{b}_3^+ \hat{b}_3 + \hat{b}_4^+ \hat{b}_4 \right). \tag{22}$$

Dễ dàng thấy bộ hàm cơ sở (18) cũng là hàm riêng của toán tử $\hat{L}_z$ ứng với trị riêng:

$$m = m_1 + m_2 = \frac{1}{2}(j_1 - j_2 - j_3 + j_4 + j_5 - j_6 - j_7 + j_8) . \tag{23}$$

Để đơn giản các công thức trong các tính toán về sau, chúng tôi sử dụng các số lượng tử $m_1 = (j_1 - j_2 - j_3 + j_4) / 2$ và $m_2 = (j_5 - j_6 - j_7 + j_8) / 2$. Từ hệ thức (21), chúng tôi có:

$$m_1 = j_1 - j_2 = - j_3 + j_4 \ ;\ m_2 = j_5 - j_6 = - j_7 + j_8 , \tag{24}$$

và từ đây: $m = j_1 - j_2 + j_5 - j_6 = - j_3 + j_4 - j_7 + j_8$. (25)

Như vậy, các chỉ số từ m, m_1, m_2 là các số nguyên. Chỉ số lượng tử từ m có thể sử dụng làm chỉ số của bộ hàm cơ sở cho các bài toán có bảo toàn hình chiếu mô-men động lượng quỹ đạo.

Chúng tôi xét lần lượt hàm sóng cơ sở cho từng electron, bắt đầu với $|\, j_1 j_2 j_3 j_4(\omega)\rangle$, trong đó chỉ số lượng tử m_1 có thể sử dụng làm chỉ số lượng tử từ của bộ hàm $|\, j_1 j_2 j_3 j_4(\omega)\rangle$. Ngoài ra, chúng tôi có thể sử dụng số lượng tử chính cho bộ hàm $|\, j_1 j_2 j_3 j_4(\omega)\rangle$, được định nghĩa như sau: $n_1 = (j_1 + j_2 + j_3 + j_4) / 2$.

Sử dụng hệ thức (21) chúng tôi có:

$$n_1 = j_1 + j_3 = j_2 + j_4 , \tag{26}$$

do đó, n_1 là số nguyên không âm. Từ các biểu thức trên, suy ra:

$$m_1 = \frac{1}{2}\left(j_1 - j_2 - j_3 + j_4\right) = n_1 - \left(j_2 + j_3\right) = -n_1 + \left(j_1 + j_4\right). \tag{27}$$

Ngoài ra, từ (21) chúng tôi có $j_4 = j_1 - j_2 + j_3$ do đó, sử dụng hai số lượng tử n_1, m_1 chúng tôi chỉ cần thêm một chỉ số lượng tử khác để cùng biểu diễn bộ hàm cơ sở. Chọn chỉ số đó là j_3, ta có thể có biểu thức cho j_1, j_2 như sau:

$$j_1 = n_1 - j_3, \quad j_2 = n_1 - m_1 - j_3, \tag{28}$$

Khi đó $j_4 = j_3 + m_1$. Ba chỉ số lượng tử (n_1, j_3, m_1) có các giá trị:

$n_1 = 0,1,2,3,....$

$j_3 \le n_1,$

$-j_3 \le m_1 \le n_1 - j_3.$

Bộ hàm cơ sở cho hạt một được viết như sau:

$$\left|n_1, m_1, j_3(\omega)\right\rangle = N_{n_1,m_1,j_3}\left(\hat{a}_1^+\right)^{n_1-j_3}\left(\hat{b}_1^+\right)^{n_1-m_1-j_3}\left(\hat{a}_2^+\right)^{j_3}\left(\hat{b}_2^+\right)^{j_3+m_1}\left|0(\omega)\right\rangle, \tag{29}$$

với hệ số chuẩn hóa: $N_{n_1,m_1,j_3} = \dfrac{1}{\sqrt{(n_1-j_3)!\, j_3!(n_1-j_3-m_1)!(m_1+j_3)!}}.$

Tính toán tương tự với bộ hàm cơ sở cho hạt hai, chúng tôi có:

$$\left|n_2, m_2, j_7(\omega)\right\rangle = N_{n_2,m_2,j_7}\left(\hat{a}_1^+\right)^{n_2-j_7}\left(\hat{b}_1^+\right)^{n_2-m_2-j_7}\left(\hat{a}_2^+\right)^{j_7}\left(\hat{b}_2^+\right)^{j_7+m_2}\left|0(\omega)\right\rangle, \tag{30}$$

với hệ số chuẩn hóa: $N_{n_2,m_2,j_7} = \dfrac{1}{\sqrt{(n_2-j_7)!\, j_7!(n_2-j_7-m_2)!(m_2+j_7)!}},$

trong đó, các chỉ số lượng tử n_2, m_2, j_7 có miền xác định như sau:

$$n_2 = 0,1,2,...\ ;\ j_7 \le n_2;\ -j_7 \le m_2 \le n_2 - j_7. \tag{31}$$

Như vậy, bộ hàm cơ sở (18) được viết lại như sau:

$$\left|n_1, m_1, n_2, m_2, k_1, k_2(\omega)\right\rangle = \left|n_1, m_1, k_1(\omega)\right\rangle\left|n_2, m_2, k_2(\omega)\right\rangle. \tag{32}$$

Ở đây, chúng tôi kí hiệu $k_1 \equiv j_3, k_2 \equiv j_7$. Bộ hàm cơ sở (32) có thể sử dụng cho việc giải phương trình Schrödinger cho nguyên tử heli bằng phương pháp đại số, và sử dụng cho các bài toán phức tạp hơn như nguyên tử heli trong từ trường.

5. Kết luận

Trong công trình này, chúng tôi đã viết phương trình Schrödinger cho nguyên tử heli dưới dạng biểu diễn đại số thông qua các toán tử sinh hủy, đồng thời xây dựng bộ hàm cơ sở dưới dạng đại số thuận tiện cho tính toán. Bộ hàm này vừa là hàm sóng của hệ hai dao động tử điều hòa bốn chiều, vừa mang đặc điểm vật lí của hàm sóng nguyên tử heli thuận tiện cho việc vận dụng các phương pháp giải khác nhau sau này cho bài toán đang xét. Nghiên cứu này có ý nghĩa trong việc phát triển phương pháp cho các bài toán phức tạp hơn, sẽ được trình bày trong các công trình tiếp theo.

❖ ***Tuyên bố về quyền lợi:*** *Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] W. Becken et al, "The helium atom in a strong magnetic field," *J.Phys. B: At.Mol.Opt. Phys* **32**, pp. 1557-1584, 1999.

[2] Ilya Feranchuk, Alexey Ivanov, Van-Hoang Le and Alexander Ulyanenkov, *Non Perturbative Description of Quantum Systems*, Springer – Switzerland, 2015.

[3] Hoang-Do Ngoc-Tram, Pham Dang-Lan and Le Van-Hoang, "Exact numerical solutions of the Schrödinger equation for a two-dimensional exciton in a homogeneous magnetic field of arbitrary strength," *Physica B* **423**, pp. 31-37, 2013.

[4] Cao Hồ Thanh Xuân, Lý Duy Nhất, Hoàng Đỗ Ngọc Trầm, "Năng lượng trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro trong từ trường đều có cường độ bất kì," *Tạp chí Khoa học Trường Đại học Sư phạm TP Hồ Chí Minh, 12*(90), tr. 39-51, 2016.

[5] Alan Kostelecky V. et al, "Baker-Campbell_Hausdorff relations for supergroups," *J. Math. Phys.* ***27*** (5), May, 1986.

PHỤ LỤC

Dạng chuẩn của toán tử e mũ $\hat{O}_1(t) = e^{2i(u_1u_2+v_1v_2)t_1+2i(u_1v_2-u_2v_1)t_2+i(u_1^2-u_2^2+v_1^2-v_2^2)t_3}$

Trong phần này, chúng tôi trình bày các tính toán để đưa toán tử dạng hàm e mũ về dạng chuẩn, là hình thức biểu diễn toán dưới dạng tích của các toán tử sinh hủy, trong đó toán tử sinh nằm về bên trái, toán tử hủy nằm về bên phải và toán tử trung hòa ở giữa, thuận lợi cho việc tính toán đại số khi sử dụng công thức (19). Khác với các toán tử có dạng đa thức, chỉ cần sử dụng tính chất giao hoán tử (13) để chuyển về dạng chuẩn, các toán tử có dạng hàm e mũ thì quy trình phức tạp hơn.

Đầu tiên chúng tôi viết $\hat{O}_1(t)$ dưới dạng toán tử (12):

$$\hat{O}_1(t) = \exp\left[t\left(-\hat{A}_1^+ - i\hat{K}_1 + \hat{A}_1\right)\right] \tag{P1}$$

với tham số mới: $t = \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + t_3^2}$ và các toán tử mới được định nghĩa như sau:

$$\hat{A}_1 = \frac{(it_1 - t_2)}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}}\hat{a}_1\hat{b}_2 + \frac{(it_1 + t_2)}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}}\hat{a}_2\hat{b}_1 + \frac{it_3}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}}\hat{a}_1\hat{b}_1 + \frac{(-it_3)}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}}\hat{a}_2\hat{b}_2,$$

$$\hat{A}_1^+ = \frac{(-it_1 - t_2)}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}}\hat{a}_1^+\hat{b}_2^+ + \frac{(-it_1 + t_2)}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}}\hat{a}_2^+\hat{b}_1^+ + \frac{(-it_3)}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}}\hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \frac{it_3}{\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}}\hat{a}_2^+\hat{b}_2^+,$$

$$i\hat{K}_1 = \frac{(-it_1 + t_2)}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2 + t_3^2}}\left(\hat{a}_1\hat{a}_2^+ + \hat{b}_1^+\hat{b}_2\right) + \frac{(-it_1 - t_2)}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2 + t_3^2}}\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_2 + \hat{b}_1\hat{b}_2^+\right)$$
$$+\frac{-(it_3)}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2 + t_3^2}}\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + 1\right) + \frac{[-(-it_3)]}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2 + t_3^2}}\left(\hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1\right), \quad \text{(P2)}$$

Để tiện sử dụng, chúng tôi dùng thêm các toán tử mới:

$$\hat{M} = \hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_2\hat{b}_2,\ \hat{M}^+ = \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+,\ \hat{N} = \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 2, \quad \text{(P3)}$$

Các toán tử trong (P2) và (P3) tuân theo các giao hoán tử như sau:

$$\left[\hat{A}_1, \hat{A}_1^+\right] = \hat{N},\ \left[\hat{A}_1, i\hat{K}_1\right] = 2\hat{M},\ \left[\hat{A}_1, \hat{M}\right] = 0,\ \left[\hat{A}_1, \hat{M}^+\right] = -i\hat{K}_1,\ \left[\hat{A}_1, \hat{N}\right] = 2\hat{A}_1,$$
$$\left[\hat{A}_1^+, i\hat{K}_1\right] = 2\hat{M}^+,\ \left[\hat{A}_1^+, \hat{M}\right] = -i\hat{K}_1,\ \left[\hat{A}_1^+, \hat{M}^+\right] = 0,\ \left[\hat{A}_1^+, \hat{N}\right] = -2\hat{A}_1^+, \quad \text{(P4)}$$
$$\left[i\hat{K}_1, \hat{M}\right] = 2\hat{A}_1,\ \left[i\hat{K}_1, \hat{M}^+\right] = 2\hat{A}_1^+,\ \left[i\hat{K}_1, \hat{N}\right] = 0,$$
$$[\hat{M}, \hat{M}^+] = \hat{N},\ [\hat{M}, \hat{N}] = 2\hat{M},\ [\hat{N}, \hat{M}^*] = 2\hat{M}^+.$$

Do các toán tử trong (P2) và (P3) lập thành một đại số kín nên chúng tôi có thể viết lại $\hat{O}_1(t)$ dưới dạng sau:

$$\hat{O}_1(t) = \exp\left[t\left(-\hat{A}_1^+ - i\hat{K}_1 + \hat{A}_1\right)\right] = e^{f_1(t)\hat{A}_1^+} e^{f_2(t)\hat{M}^+} e^{f_3(t)\mathrm{i}\hat{K}_1} e^{f_4(t)\hat{N}} e^{f_5(t)\hat{M}} e^{f_6(t)\hat{A}_1}, \quad \text{(P5)}$$

với $f_1(t),\ f_2(t),\ f_3(t),\ f_4(t),\ f_5(t),\ f_6(t)$ là các hàm số cần tìm thỏa điều kiện biên:

$$f_1(0) = f_2(0) = f_3(0) = f_4(0) = f_5(0) = f_6(0) = 0, \quad \text{(P6)}$$

Lấy đạo hàm hai vế của (P5) theo t, sau đó nhân hai vế của biểu thức vừa thu được với toán tử nghịch đảo:

$$\hat{O}_1^{-1}(t) = e^{-f_6(t)\hat{A}_1} e^{-f_5(t)\hat{M}} e^{-f_4(t)\hat{N}} e^{-f_3(t)i\hat{K}_1} e^{-f_2(t)\hat{M}^+} e^{-f_1(t)\hat{A}_1^+},$$

chúng tôi có:

$$\left(-\hat{A}_1^+ - i\hat{K}_1 + \hat{A}_1\right) = f_1'(t)\hat{A}_1^+ + f_2'(t)e^{f_1(t)\hat{A}_1^+}\hat{M}^+e^{-f_1(t)\hat{A}_1^+}$$
$$+f_3'(t)e^{f_1(t)\hat{A}_1^+}e^{f_2(t)\hat{M}^+}\left(i\hat{K}_1\right)e^{-f_2(t)\hat{M}^+}e^{-f_1(t)\hat{A}_1^+}$$
$$+f_4'(t)e^{f_1(t)\hat{A}_1^+}e^{f_2(t)\hat{M}^+}e^{f_3(t)i\hat{K}_1}\hat{N}e^{-f_3(t)i\hat{K}_1}e^{-f_2(t)\hat{M}^+}e^{-f_1(t)\hat{A}_1^+} \quad \text{(P7)}$$
$$+f_5'(t)e^{f_1(t)\hat{A}_1^+}e^{f_2(t)\hat{M}^+}e^{f_3(t)i\hat{K}_1}e^{f_4(t)\hat{N}}\hat{M}e^{-f_4(t)\hat{N}}e^{-f_3(t)i\hat{K}_1}e^{-f_2(t)\hat{M}^+}e^{-f_1(t)\hat{A}_1^+}$$
$$+f_6'(t)e^{f_1(t)\hat{A}_1^+}e^{f_2(t)\hat{M}^+}e^{f_3(t)i\hat{K}_1}e^{f_4(t)\hat{N}}e^{f_5(t)\hat{M}}\hat{A}_1e^{-f_5(t)\hat{M}}e^{-f_4(t)\hat{N}}e^{-f_3(t)i\hat{K}_1}e^{-f_2(t)\hat{M}^+}e^{-f_1(t)\hat{A}_1^+},$$

Sử dụng công thức Baker-Campbell- Hausdorff [5]:

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \frac{1}{2!}\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] + \ldots,$$

để khai triển các thành phần toán tử trong (P7), sau đó tiến hành đồng nhất hai vế của (P7), chúng tôi thu được hệ phương trình sau:

$$\begin{aligned}\hat{A}_1^+:\ -1 &= f_1'(t) - 2f_2(t)f_3'(t) - 2f_1(t)f_4'(t)\\ &+2f_1(t)f_2(t)e^{-2f_4(t)}\left\{f_5'(t)\cos[2f_3(t)] - f_6'(t)\sin[2f_3(t)]\right\}\\ &+\left\{[f_1(t)]^2 - [f_2(t)]^2\right\}e^{-2f_4(t)}\left\{f_5'(t)\sin[2f_3(t)] + f_6'(t)\cos[2f_3(t)]\right\},\end{aligned} \tag{P8}$$

$$\begin{aligned}i\hat{K}_1:\ -1 &= f_3'(t) + f_1(t)e^{-2f_4(t)}\left\{f_5'(t)\cos[2f_3(t)] - f_6'(t)\sin[2f_3(t)]\right\}\\ &+ f_2(t)e^{-2f_4(t)}\left\{f_5'(t)\sin[2f_3(t)] + f_6'(t)\cos[2f_3(t)]\right\},\end{aligned} \tag{P9}$$

$$\hat{A}_1:\ 1 = e^{-2f_4(t)}\left\{f_5'(t)\sin[2f_3(t)] + f_6'(t)\cos[2f_3(t)]\right\}, \tag{P10}$$

$$\begin{aligned}\hat{M}^+:\ 0 &= f_2'(t) + 2f_1(t)f_3'(t) - 2f_2(t)f_4'(t)\\ &+2f_1(t)f_2(t)e^{-2f_4(t)}\left\{f_5'(t)\sin[2f_3(t)] + f_6'(t)\cos[2f_3(t)]\right\}\\ &-\left\{[f_1(t)]^2 - [f_2(t)]^2\right\}e^{-2f_4(t)}\left\{f_5'(t)\cos[2f_3(t)] - f_6'(t)\sin[2f_3(t)]\right\}\end{aligned} \tag{P11}$$

$$\begin{aligned}\hat{N}:\ 0 &= f_4'(t) - f_1(t)e^{-2f_4(t)}\left\{f_5'(t)\sin[2f_3(t)] + f_6'(t)\cos[2f_3(t)]\right\}\\ &- f_2(t)e^{-2f_4(t)}\left\{f_5'(t)\cos[2f_3(t)] - f_6'(t)\sin[2f_3(t)]\right\},\end{aligned} \tag{P12}$$

$$\hat{M}:\ 0 = e^{-2f_4(t)}\left\{f_5'(t)\cos[2f_3(t)] - f_6'(t)\sin[2f_3(t)]\right\}. \tag{P13}$$

Giải hệ sáu phương trình trên, chúng tôi thu được nghiệm như sau:

$$\begin{aligned}&f_1(t) = -\frac{t}{1+t^2},\ f_2(t) = -\frac{t^2}{1+t^2},\ f_3(t) = -arctgt,\\ &f_4(t) = -\frac{1}{2}\ln(1+t^2),\ f_5(t) = -\frac{t^2}{1+t^2},\ f_6(t) = \frac{t}{1+t^2}.\end{aligned} \tag{P14}$$

Như vậy, chúng tôi thu được dạng chuẩn của toán tử $\hat{O}_1(t)$ dạng e mũ thuận tiện cho các tính toán đại số như sau:

$$\begin{aligned}\hat{O}_1\left(\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right) &= e^{-\frac{\left(\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)}{1+\left(\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^2}\hat{A}_1^+}\, e^{-\frac{\left(\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^2}{1+\left(\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^2}\hat{M}^+}\, e^{-arctg\left(\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)(i\hat{K}_1)}\\ &\times\left[1+\left(t_1^2+t_2^2+t_3^2\right)\right]^{-\hat{N}/2} e^{-\frac{\left(\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^2}{1+\left(\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^2}\hat{M}}\, e^{\frac{\left(\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)}{1+\left(\sqrt{t_1^2+t_2^2+t_3^2}\right)^2}\hat{A}_1}.\end{aligned} \tag{P15}$$