TẠP CHÍ KHOA HỌC
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM TP HỒ CHÍ MINH
Tập 16, Số 9 (2019): 301-308
HO CHI MINH CITY UNIVERSITY OF EDUCATION
JOURNAL OF SCIENCE
Vol. 16, No. 9 (2019): 301-308
ISSN: 1859-3100
Website: http://journal.hcmue.edu.vn

Bài báo nghiên cứu

PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ FK CHO ION PHÂN TỬ H_2^+ PHẲNG TRONG ĐIỆN TRƯỜNG ĐỀU

Nguyễn Thị Ý Nhi, Hoàng Đỗ Ngọc Trầm*
Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh
**Tác giả liên hệ: Hoàng Đỗ Ngọc Trầm – Email: tramhdn@hcmue.edu.vn*
Ngày nhận bài: 10-01-2019; ngày nhận bài sửa: 05-4-2019; ngày duyệt đăng: 18-5-2019

TÓM TẮT

Trong công trình này chúng tôi đề cập việc khảo sát bài toán ion phân tử trong điện trường tĩnh có cường độ bất kì, bằng cách phát triển phương pháp toán tử FK. Kết quả thu được các yếu tố ma trận của Hamiltonian cho phép tính toán nghiệm số (năng lượng và hàm sóng) của bài toán.

Từ khóa: ion phân tử hydro hai chiều, phương pháp toán tử FK, yếu tố ma trận, numerical solution.

1. Mở đầu

Ion phân tử H_2^+ (molecular hydrogen ion, viết tắt là MHI) luôn là đối tượng nghiên cứu của lí thuyết lẫn thực nghiệm, do đây là bài toán kinh điển nhưng vẫn liên quan đến nhiều hiệu ứng mới. Phổ năng lượng và cấu trúc tinh tế, siêu tinh tế của MHI được tính toán từ những năm 30 đến nay (Bates, Ledsham, & Stewart, 2006; Vladimir I. Korobov, Koelemeij, Hilico, & Karr, 2016). Đó cũng là cơ sở để xác định một số hằng số cơ bản, ví dụ như tỉ số khối lượng của các hạt proton và electron, hằng số Rydberg, bán kính proton (Karr, Hilico, Koelemeij, & Korobov, 2016; Korobov, Danev, Bakalov, & Schiller, 2018).

Việc xác định phổ năng lượng cho MHI trong trường hợp hai chiều có ý nghĩa do có nhiều hiệu ứng mới do hiệu ứng giảm số chiều; đồng thời, đây cũng là mô hình đơn giản hóa của các hệ vật lí có cấu trúc tương tự đang được quan tâm hiện nay, như các exciton trong các vật liệu hai chiều (Patil, 2003).

Với sự phát triển của công nghệ chế tạo laser xung cực ngắn, việc trích xuất thông tin phân tử từ phổ sóng điều hòa được quan tâm, trong đó hàm sóng chính xác của phương trình Schrödinger dừng là thông tin đầu vào cần thiết, do đó việc xác định nghiệm cho phương trình Schrödinger của MHI hai chiều dưới tác dụng của trường laser có ý nghĩa

Cite this article as: Nguyen Thi Y Nhi, & Hoang Do Ngoc Tram (2019). FK operator for two-dimensional molecular hydrogen ion H_2^+ in a uniform electric field. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science, 16*(9), 301-308.

(Avanaki, Telnov, Jooya, & Chu, 2015; Du, Wang, Li, Zhou, & Zhao, 2018; Ivanov & Schinke, 2004); trong đó, bài toán MHI hai chiều trong điện trường đều là bước trung gian để phát triển phương pháp giải phương trình Schrödinger cho các hệ nêu trên.

Với mục tiêu phát triển phương pháp toán tử FK (FK Operator Method, viết tắt là FK-OM), phương pháp phi nhiễu loạn đã áp dụng thành công cho hệ nguyên tử hai chiều trong từ trường (Hoang-Do, Pham, & Le, 2013); trong bài báo này, chúng tôi phát triển phương pháp này cho MHI hai chiều trong điện trường đều. Quy trình giải và các công thức cần thiết cho việc xác định nghiệm số chính xác của bài toán được trình bày cụ thể.

2. Phương pháp đại số cho MHI hai chiều trong điện trường đều

Chúng ta xét mô hình MHI phẳng trong gần đúng Born-Oppenheimer, hai hạt nhân xem như cố định ở vị trí $(0,0)$ và $(R,0)$, với R là khoảng cách liên hạt nhân. Khi đó phương trình Schrödinger không thứ nguyên cho MHI hai chiều trong điện trường đều có dạng như sau:

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

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

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

Ta sẽ giải phương trình (1)-(2) bằng FK-OM, trong đó ý tưởng chính tương tự lí thuyết nhiễu loạn với thành phần chính là dao động tử điều hòa. Các nghiên cứu trước (Hoang-Do et al., 2013) đã chỉ ra mối liên hệ giữa bài toán nguyên tử trong không gian (x,y) với bài toán dao động tử phi điều hòa trong không gian (u,v) thông qua phép biến đổi Levi-Civita:

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

với $dxdy=4(x^2+y^2)dudv$, $r=\sqrt{x^2+y^2}=u^2+v^2$. Do đó, khi chọn bộ hàm sóng cơ sở trong không gian (u,v) là dao động tử điều hòa tương ứng với hàm sóng nguyên tử trong không gian (x,y).

Mặt khác, trong các số hạng tương tác Coulomb có chứa biến động lực học ở mẫu số, ta cần tìm cách đưa các biến này khỏi mẫu số để có thể sử dụng các tính toán đại số trong FK-OM. Đối với bài toán nguyên tử hydro, phép biến đổi Levi-Civita ngoài việc đưa bài toán về dạng dao động tử phi điều hòa cũng đồng thời giải quyết được khó khăn này. Đối với bài toán đang xét, vẫn còn một số hạng tương tác Coulomb cần phải xử lí, do đó ta sẽ sử dụng phép biến đổi Fourier ngược

$$\frac{1}{\sqrt{y^2+(x-R)^2}}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt_1dt_2}{\sqrt{t_1^2+t_2^2}}e^{it_1(x-R)+it_2y}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt_1dt_2}{\sqrt{t_1^2+t_2^2}}e^{it_1\left(u^2-v^2-R\right)+2it_2uv}. \quad (4)$$

Khi đó ta viết lại được phương trình Schrödinger cho MHI hai chiều trong điện trường đều trong không gian (u,v) như sau:

$$r\left(\hat{H}-E\right)\psi=0 \text{ hay } \left(\tilde{H}^R-E\hat{R}\right)\psi=0, \quad (5)$$

trong đó

$$\tilde{H}^R=-\frac{1}{8}\left(\frac{\partial^2}{\partial u^2}+\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right)-1+\frac{1}{R}\left(u^2+v^2\right)+\beta_1\left(u^2+v^2\right)\left(u^2-v^2\right)$$
$$+2\beta_2\left(u^2+v^2\right)uv-\beta_1\left(u^2+v^2\right)R-\frac{\left(u^2+v^2\right)}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt_1dt_2}{\sqrt{t_1^2+t_2^2}}e^{it_1\left(u^2-v^2-R\right)-2it_2uv}, \quad (6)$$

$$\hat{R}=u^2+v^2.$$

Phương pháp đại số sẽ được sử dụng để giải phương trình Schrödinger (5), (6) thông qua các toán tử sinh, hủy Dirac được định nghĩa lần lượt sau đây:

$$\hat{u}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(u+\frac{\partial}{\partial u}\right),\qquad \hat{u}^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(u-\frac{\partial}{\partial u}\right),$$
$$\hat{v}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(v+\frac{\partial}{\partial v}\right),\qquad \hat{v}^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(v-\frac{\partial}{\partial v}\right), \quad (7)$$

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

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

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

$$\begin{aligned}
\hat{a} &= \frac{1}{2\sqrt{2\omega}}\left[(\omega+1)(\hat{u}+i\hat{v})+(\omega-1)(\hat{u}^{+}+i\hat{v}^{+})\right],\\
\hat{a}^{+} &= \frac{1}{2\sqrt{2\omega}}\left[(\omega-1)(\hat{u}-i\hat{v})+(\omega+1)(\hat{u}^{+}-i\hat{v}^{+})\right],\\
\hat{b} &= \frac{1}{2\sqrt{2\omega}}\left[(\omega+1)(\hat{u}-i\hat{v})+(\omega-1)(\hat{u}^{+}-i\hat{v}^{+})\right],\\
\hat{b}^{+} &= \frac{1}{2\sqrt{2\omega}}\left[(\omega-1)(\hat{u}+i\hat{v})+(\omega+1)(\hat{u}^{+}+i\hat{v}^{+})\right].
\end{aligned} \tag{8}$$

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

Ở đây, ta đưa vào các toán tử (8) một tham số tự do, đóng vai trò điều chỉnh tốc độ hội tụ. Tham số này sẽ không ảnh hưởng đến kết quả bài toán vì nó không có mặt trong toán tử Hamilton toàn phần mà chỉ xuất hiện trong thành phần chính và thành phần nhiễu loạn, nó đóng vai trò điều chỉnh sự chênh lệch độ lớn giữa hai thành phần này nhằm thỏa mãn điều kiện nhiễu loạn, do đó cũng làm tăng tốc độ hội tụ của bài toán.

Ta viết lại được Hamiltonian của bài toán như sau:

$$\begin{aligned}
\tilde{H}^{R} &= \left[\frac{1}{\omega R}+\frac{\omega}{8}-\frac{R\beta_1}{\omega}\right]\hat{N}-1+\left[\frac{1}{\omega R}-\frac{\omega}{8}-\frac{R\beta_1}{\omega}\right]\left(\hat{M}+\hat{M}^{+}\right)\\
&+\frac{\beta_1}{2\omega^2}\left(\widehat{N}+\widehat{M}+\widehat{M}^{+}\right)\left(\hat{a}^2+\hat{a}^{+2}+\hat{b}^2+\hat{b}^{+2}+2\hat{a}\hat{b}^{+}+2\hat{a}^{+}\hat{b}\right)\\
&-\frac{i\beta_2}{2\omega^2}\left(\widehat{N}+\widehat{M}+\widehat{M}^{+}\right)\left(\hat{a}^2-\hat{a}^{+2}-\hat{b}^2+\hat{b}^{+2}+2\hat{a}\hat{b}^{+}-2\hat{a}^{+}\hat{b}\right)\\
&-\frac{\left(\hat{N}+\hat{M}+\hat{M}^{+}\right)}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt_1\,dt_2}{\sqrt{t_1^2+t_2^2}}e^{-2i\omega Rt_1}\widehat{O}
\end{aligned} \tag{9}$$

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

trong đó toán tử

$$\hat{O}=\exp\left[\sqrt{t_1^2+t_2^2}\left(-\hat{A}^{+}-2i\hat{K}+\hat{A}\right)\right] \tag{10}$$

với

$$\begin{aligned}
\hat{A} &= \frac{it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^{\,2} + t_2^{\,2}}}\hat{a}^2 - \frac{-it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^{\,2} + t_2^{\,2}}}\hat{b}^2, \\
\hat{A}^+ &= \frac{-it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^{\,2} + t_2^{\,2}}}\hat{a}^{+2} - \frac{it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^{\,2} + t_2^{\,2}}}\hat{b}^{+2}, \\
\hat{K} &= \frac{i\left(it_1 + t_2\right)}{\sqrt{t_1^{\,2} + t_2^{\,2}}}\hat{a}\hat{b}^+ - \frac{i\left(-it_1 + t_2\right)}{\sqrt{t_1^{\,2} + t_2^{\,2}}}\hat{a}^+\hat{b}.
\end{aligned} \tag{11}$$

Toán tử (9) cũng đã được về dạng chuẩn thuận lợi cho các tính toán đại số (Nguyen, & Hoang, 2018):

$$\begin{aligned}
\hat{O} = {} & e^{\frac{it_1 - t_2}{4\left(t_1^{\,2} + t_2^{\,2}\right)+1}\hat{a}^{+2}} e^{\frac{it_1 + t_2}{4\left(t_1^{\,2} + t_2^{\,2}\right)+1}\hat{b}^{+2}} e^{\frac{-4\left(t_1^{\,2} + t_2^{\,2}\right)}{4\left(t_1^{\,2} + t_2^{\,2}\right)+1}\hat{M}^+} e^{2\sqrt{t_1^2 + t_2^2}\,\hat{m}^+} \\
& \times\left[4\left(t_1^{\,2} + t_2^{\,2}\right)+1\right]^{\left(\hat{n} - \hat{N}\right)/2} e^{-2\sqrt{t_1^2 + t_2^2}\,\hat{m}} e^{\frac{-4\left(t_1^{\,2} + t_2^{\,2}\right)}{4\left(t_1^{\,2} + t_2^{\,2}\right)+1}\hat{M}} e^{\frac{\left(it_1 + t_2\right)}{4\left(t_1^{\,2} + t_2^{\,2}\right)+1}\hat{a}^2} e^{\frac{\left(it_1 - t_2\right)}{4\left(t_1^{\,2} + t_2^{\,2}\right)+1}\hat{b}^2},
\end{aligned} \tag{12}$$

trong đó

$$\hat{m}^+ = \left(\frac{it_1 - t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\right)\hat{a}^+\hat{b}, \quad \hat{m} = -\left(\frac{it_1 + t_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}\right)\hat{a}\hat{b}^+, \; \hat{n} = \hat{a}^+\hat{a} - \hat{b}^+\hat{b}. \tag{13}$$

3. Kết quả

Sử dụng bộ hàm sóng cơ sở của dao động tử điều hòa (Nguyen et al., 2018), ta tính được các yếu tố ma trận của các toán tử (9), kết quả này là cơ sở để xác định nghiệm số chính xác cho bài toán thông qua việc giải phương trình (5) theo sơ đồ lí thuyết nhiễu loạn hoặc giải trực tiếp hệ phương trình tuyến tính.

Để thuận tiện, ta viết lại

$$\tilde{H}^R = \tilde{H}_1^R + \tilde{H}_2^R, \tag{14}$$

với

$$\begin{aligned}
\tilde{H}_1^R = {} & \left[\frac{1}{\omega R} + \frac{\omega}{8} - \frac{R\beta_1}{\omega}\right]\hat{N} + \left[\frac{1}{\omega R} - \frac{\omega}{8} - \frac{R\beta_1}{\omega}\right]\left(\hat{M} + \hat{M}^+\right) - 1, \\
& + \frac{\beta_1}{2\omega^2}\left(\widehat{N} + \widehat{M} + \widehat{M}^+\right)\left(\hat{a}^2 + \hat{a}^{+2} + \hat{b}^2 + \hat{b}^{+2} + 2\hat{a}\hat{b}^+ + 2\hat{a}^+\hat{b}\right) \\
& - \frac{i\beta_2}{2\omega^2}\left(\widehat{N} + \widehat{M} + \widehat{M}^+\right)\left(\hat{a}^2 - \hat{a}^{+2} - \hat{b}^2 + \hat{b}^{+2} + 2\hat{a}\hat{b}^+ - 2\hat{a}^+\hat{b}\right)
\end{aligned} \tag{15}$$

$$\tilde{H}_2^R = -\frac{\left(\hat{N} + \hat{M} + \hat{M}^+\right)}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt_1\,dt_2}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2}}e^{-2i\omega Rt_1}\hat{O}.$$

Ta tính được các yếu tố ma trận khác không như sau:

- *Yếu tố ma trận của* $\tilde{R}$

$$R_{\substack{n_1,n_1\\ n_2,n_2}} = \frac{1}{\omega}\left(n_1+n_2+1\right),$$
$$R_{\substack{n_1,n_1+1\\ n_2,n_2+1}} = \frac{1}{\omega}\sqrt{\left(n_1+1\right)\left(n_2+1\right)}. \tag{16}$$

- *Yếu tố ma trận của* $\tilde{H}_1^R$

$$\left(\tilde{H}_1^R\right)_{\substack{n_1,n_1-1\\ n_2,n_2+1}} = 3\left(\beta_1-\beta_2 i\right)\frac{1}{2\omega^2}\left(n_1+n_2+1\right)\sqrt{n_1\left(n_2+1\right)},$$
$$\left(\tilde{H}_1^R\right)_{\substack{n_1,n_1+2\\ n_2,n_2}} = \left(\beta_1+\beta_2 i\right)\frac{1}{2\omega^2}\left(n_1+3n_2+3\right)\sqrt{\left(n_1+1\right)\left(n_1+2\right)},$$
$$\left(\tilde{H}_1^R\right)_{\substack{n_1,n_1\\ n_2,n_2+2}} = \left(\beta_1-\beta_2 i\right)\frac{1}{2\omega^2}\left(3n_1+n_2+3\right)\sqrt{\left(n_2+1\right)\left(n_2+2\right)}, \tag{17}$$
$$\left(\tilde{H}_1^R\right)_{\substack{n_1,n_1+3\\ n_2,n_2+1}} = \left(\beta_1+\beta_2 i\right)\frac{1}{2\omega^2}\sqrt{\frac{\left(n_1+3\right)!}{n_1!}}\sqrt{\left(n_2+1\right)},$$
$$\left(\tilde{H}_1^R\right)_{\substack{n_1,n_1+1\\ n_2,n_2+3}} = \left(\beta_1-\beta_2 i\right)\frac{1}{2\omega^2}\sqrt{\frac{\left(n_2+3\right)!}{n_2!}}\sqrt{\left(n_1+1\right)}.$$

- *Yếu tố ma trận của* $\tilde{H}_2^R$

$$\left(\tilde{H}_2^R\right)_{\substack{n_1,n_1+s\\ n_2,n_2+s-2ss}} = -2\sqrt{\left(n_1+s+1\right)\left(n_2+s-2ss+1\right)}F_{\substack{n_1,n_1+s+1\\ n_2,n_2+s-2ss+1}}$$
$$-2\left(n_1+n_2+2s-2ss+1\right)F_{\substack{n_1,n_1+s\\ n_2,n_2+s-2ss}} - 2\sqrt{\left(n_1+s\right)\left(n_2+s-2ss\right)}F_{\substack{n_1,n_1+s-1\\ n_2,n_2+s-2ss-1}}, \tag{18}$$

trong đó

$$F_{\substack{n_1,n_1+s+l\\ n_2,n_2+s-2ss+l}} = \sqrt{n_1!n_2!\left(n_1+s+l\right)!\left(n_2+s+l-2ss\right)!}$$
$$\times\sum_{i_6}^{\left[\frac{n_1+s+l}{2}\right]}\sum_{i_5}^{\left[\frac{n_2+s+l-2ss}{2}\right]}\sum_{i_4}^{n_1-2i_1-i_3}\sum_{i_3}^{\min\left(n_1-2i_1,n_2-2i_2\right)}\sum_{i_2}^{\left[\frac{n_2}{2}\right]}\sum_{i_1}^{\left[\frac{n_1}{2}\right]} I^{ss}_{s+l-ss+2i_1+i_2+2i_3+i_4-i_6,\,n_2+s+l-ss+2i_1+i_3+i_4+1/2}\left(\omega R\right)$$
$$\times\frac{2^{ss-i_1-i_2-i_5-i_6}}{i_1!i_2!i_3!i_4!i_5!i_6!\left(ss+i_1-i_2+i_4+i_5-i_6\right)!\left(s+l-ss+i_1+i_2+i_3-i_5-i_6\right)!}$$
$$\times\frac{\left(n_2-2i_2-i_3+i_4\right)!}{\left(n_2-2i_2-i_3\right)!\left(n_2-ss-i_1-i_2-i_3-i_5+i_6\right)!\left(n_1-2i_1-i_3-i_4\right)!}, \tag{19}$$

với

$$
\begin{aligned}
I_{\alpha,\beta}^{\gamma}(\omega R) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-2i\omega R t_1}dt_1dt_2}{\sqrt{t_1^2+t_2^2}}\frac{\left[-4\left(t_1^2+t_2^2\right)\right]^{\alpha}\left(it_1-t_2\right)^{\gamma}}{\left[1+4\left(t_1^2+t_2^2\right)\right]^{\beta}} \\
&= \frac{(-1)^{\gamma+\alpha}4^{\alpha}}{2\pi}\int_{0}^{+\infty}\frac{r^{\gamma+2\alpha}}{\left[4r^2+1\right]^{\beta}}J_{\gamma}(-2\omega R r)\,dr,
\end{aligned}
\tag{20}
$$

$$
J_{\gamma}(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} e^{i(x\sin\theta-\theta\gamma)}d\theta \tag{21}
$$

là hàm Bessel.

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

$$
R_{\substack{n_1,n_1^{'}\\ n_2,n_2^{'}}} = R_{\substack{n_1^{'},n_1\\ n_2^{'},n_2}}, \qquad H^{R}_{\substack{n_1,n_1^{'}\\ n_2,n_2^{'}}} = (H^{R}_{\substack{n_1^{'},n_1\\ n_2^{'},n_2}})^{*}. \tag{22}
$$

4. Kết luận

Chúng tôi đã xác định được các phần tử ma trận của phương trình Schrödinger cho bài toán MHI trong điện trường đều và có thể lập trình tính toán. Kết quả này có thể áp dụng cho bài toán exiton dương trong điện trường. Và đây sẽ là cơ sở để phát triển phương pháp cho giải bài toán MHI trong các trường ngoài phức tạp hơn, cũng như các hệ phức tạp hơn trong điện trường đều.

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

❖ ***Lời cảm ơn:*** *Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh trong đề tài cơ sở mã số CS2016.19.13.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Avanaki, K. N., Telnov, D. A., Jooya, H. Z., & Chu, S. I. (2015). Generation of below-threshold even harmonics by a stretched H_2^+ molecular ion in intense linearly and circularly polarized laser fields. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, *92*(6), 063811-063818. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.92.063811

Bates, D. R., Ledsham, K., & Stewart, A. L. (2006). Wave Functions of the Hydrogen Molecular Ion. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, *246*(911), 215-240. https://doi.org/10.1098/rsta.1953.0014

Du, L. L., Wang, G. L., Li, P. C., Zhou, X. X., & Zhao, Z. X. (2018). Interference effect in low-order harmonic generation of H_2^+ in intense laser fields. *Physical Review A*, *97*(2), 023404-023406. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.97.023404

Hoang-Do, N. T., Pham, D. L., & Le, V. H. (2013). Exact numerical solutions of the Schrodinger equation for a two-dimensional exciton in a constant magnetic field of arbitrary strength.

Physica B: Condensed Matter, *423*, 31-37. https://doi.org/10.1016/j.physb.2013.04.040

Ivanov, M. V., & Schinke, R. (2004). Two-dimensional analogs of the H_2^+ + ion in stationary electric fields. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, *69*(16), 1-9. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.165308

Karr, J. P., Hilico, L., Koelemeij, J. C. J., & Korobov, V. I. (2016). Hydrogen molecular ions for improved determination of fundamental constants. *Physical Review A*, *94*(5), 6-10. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.050501

Korobov, V. I., Danev, P., Bakalov, D., & Schiller, S. (2018). Laser-stimulated electric quadrupole transitions in the molecular hydrogen ion H_2^+. *Physical Review A*, *97*(3), 032505–032508. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.97.032505

Korobov, Vladimir I., Koelemeij, J. C. J., Hilico, L., & Karr, J. P. (2016). Theoretical Hyperfine Structure of the Molecular Hydrogen Ion at the 1 ppm Level. *Physical Review Letters*, *116*(5), 1-5. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.053003

Nguyen, Phuong Duy Anh, Hoang, Do Ngoc Tram (2018). Matrix elements for two-dimensional heli atom. *Ho Chi Minh City Unviversity of Education Journal of Science (Special Issue: Natural Sciences and Technology, 15*(9), 22-34.

Patil, S. H. (2003). Hydrogen molecular ion and molecule in two dimensions. *Journal of Chemical Physics*, *118*(5), 2197-2205. https://doi.org/10.1063/1.1531103

FK OPERATOR FOR TWO-DIMENSIONAL MOLECULAR HYDROGEN ION H_2^+ IN A UNIFORM ELECTRIC FIELD

Nguyen Thi Y Nhi, Hoang Do Ngoc Tram [*]

Ho Chi Minh City University of Education

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

Received: January 10, 2019; Revised: April 05, 2019; Accepted: May 18, 2019

ABSTRACT

The article shows how the Schrödinger equation of two-dimensional molecular hydrogen ion H_2^+ *in a uniform electric field was solved by using the FK operator method. Matrix elements of Hamiltonian are obtained, which allows calculating numerical solutions (wave functions and energy) of the problem.*

Keywords: two-dimensional molecular hydrogen ion, FK operator method, matrix elements, numerical solution.