NĂNG LƯỢNG TRẠNG THÁI CƠ BẢN CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO TRONG TỪ TRƯỜNG ĐỀU CÓ CƯỜNG ĐỘ BẤT KÌ

CAO HỒ THANH XUÂN[*], LÝ DUY NHẤT[**], HOÀNG ĐỖ NGỌC TRẦM[***]

TÓM TẮT

Năng lượng trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro trong từ trường đều với cường độ lên đến 2.35×10^{14}G *được tính số chính xác đến 7 – 15 chữ số thập phân. Ở đây, bài toán đang xét được đưa về bài toán dao động tử phi điều hòa bốn chiều qua phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel và nhờ đó mà phương pháp toán tử FK có thể áp dụng để giải phương trình Schrödinger cho bài toán. Kết quả thu được là một mở rộng đáng kể so với các số liệu thu trước đây, đặc biệt là trong vùng từ trường siêu cao có nhiều ứng dụng. Phương pháp toán tử FK cũng được cải tiến cho phép tính toán cho các trạng thái kích thích cao.*

Từ khóa: phương pháp toán tử FK, nguyên tử hydro, từ trường, năng lượng trạng thái cơ bản.

ABSTRACT

Ground state energy of a hydrogen atom in a uniform magnetic field with arbitrary strength

The ground state energy of a hydrogen atom in a uniform magnetic field are calculated numerically with precision of seven to fifteen decimal places for the field strength of up to $2.35\text{x}10^{14}$G*. Here, the Kustaanheimo-Stiefel transformation is used to transform the problem into that of a four-dimentional anharmonic oscillator, then the FK operator method (FK-OM) is developed for solving the Schrödinger equation of the latter. The precision of the obtained numerical results are a significant progression in comparison with earlier works, especially in the practical zone of superhigh intensity of magnetic field. FK-OM is also developed in order to calculate energy of excited states of hydrogen atom in a magnetic field in the next work.*

Keyworks: FK operator method, hydrogen atom, magnetic field, ground state energy.

1. Mở đầu

Bài toán nguyên tử hydro trong từ trường là một bài toán kinh điển trong cơ học lượng tử, và đã được nghiên cứu trong một thời gian rất dài; mặc dù vậy, hiện nay bài toán này vẫn được quan tâm do liên quan đến các nghiên cứu thực nghiệm về phổ của các nguyên tử đặt trong từ trường mạnh ở các sao lùn trắng và sao nơtron trong vật lí thiên văn (xem công trình [3], [10] và các trích dẫn trong đó).

[*] ThS, Trường Cao đẳng Nông nghiệp Nam Bộ; *Email: xuanthnb@gmail.com*
[**] ThS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM
[***] TS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

Trong công trình nghiên cứu của các tác giả khác, phương trình Schrödinger cho nguyên tử hydro trong từ trường được giải bằng nhiều phương pháp khác nhau. Phương pháp nhiễu loạn [3] chỉ áp dụng trong vùng từ trường nhỏ, phương pháp gần đúng đoạn nhiệt [7] cũng được áp dụng cho vùng từ trường rất cao nhưng năng lượng liên kết lại sai với kết quả thực tế đến ba lần. Năm 1984, Rösner và các cộng sự [5] đã tính phổ năng lượng của nguyên tử hydro cho một dải rộng từ trường bằng bộ chương trình Hatree-Fock của Fischer; tuy nhiên, phương pháp này lại hoạt động kém ở vùng từ trường trung bình, còn ở vùng từ trường siêu cao thì không thấy thể hiện kết quả. Năm 1996, Kravchenko và các cộng sự đã áp dụng thành công phương pháp biến phân [7] để tìm nghiệm chính xác đến 10^{-12} cho bài toán nguyên tử hydro trong từ trường; tuy nhiên, phương pháp này chưa thể hiện được kết quả ở vùng từ trường siêu cao. Năm 2007, tác giả Vieyra sử dụng phương pháp gần đúng Born-Oppenheimer bậc không [8] kết hợp với phép biến phân, tìm được nghiệm chính xác bằng số cho các trạng thái kích thích thấp trong vùng từ trường từ 0 đến 4.42×10^{13}G, với độ chính xác là 10^{-2} trong vùng từ trường lớn. Năm 2009, tác giả Thirumalai [2] áp dụng phương pháp Hatree-Fock hai chiều cho nguyên tử hydro và heli trong khoảng từ trường 0 đến 4.70×10^{10}G, với độ chính xác là 10^{-5}. Năm 2014, Sasmal [9] đã dùng phương pháp thể tích giới hạn để tìm được hàm sóng, năng lượng, cấu trúc của nguyên tử hydro trong từ trường có cường độ trong khoảng từ 0 đến 1.41×10^{12}G với độ chính xác 10^{-6}. Các phương pháp kể trên đều chưa đáp ứng được nhu cầu của thực nghiệm trong vật lí thiên văn do chưa thu được phổ năng lượng của nguyên tử hydro khi đặt trong vùng từ trường có cường độ lớn hơn.

Để thu được nghiệm bằng số có độ chính xác cao cho bài toán nguyên tử hydro trong từ trường có cường độ bất kì, chúng tôi sử dụng phương pháp toán tử FK [1]. Phương pháp toán tử FK (FK Operator Method, viết tắt là FK-OM) được xây dựng từ những năm 1980 bởi nhóm nghiên cứu của các giáo sư Feranchuk và Komarov và đã được áp dụng thành công cho một loạt bài toán trong vật lí chất rắn, lí thuyết trường, vật lí nguyên tử, phân tử (xem cuốn sách chuyên khảo [1] và các trích dẫn trong đó). Trong công trình này, FK-OM cải tiến kết hợp với phép biến đổi Kustaanheimo – Stiefel đã được sử dụng để chuyển bài toán nguyên tử hydro ba chiều sang bài toán dao động tử phi điều hòa bốn chiều, đưa ra các công thức cần thiết cho việc tính toán các yếu tố ma trận bằng phương pháp thuần đại số [1], phương pháp chéo hóa ma trận được sử dụng để tìm nghiệm chính xác bằng số.

Cấu trúc bài báo gồm ba phần chính: Phần thứ nhất giới thiệu FK-OM và áp dụng cho bài toán nguyên tử hydro trong từ trường có cường độ bất kì; phần thứ hai trình bày kết quả thu được và thảo luận; phần cuối cùng là kết luận và dự kiến phát triển của đề tài.

2. Nguyên tử hydro trong từ trường

Phương trình Schrödinger sử dụng phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel để tìm các mức năng lượng của nguyên tử hydro trong từ trường đã được trình bày trong công

trình [1, tr. 252-258]. Để sử dụng trong tính toán của công trình này, các ý tưởng và công thức chính sẽ được trình bày lại trong phần này.

Phương trình Schrödinger cho nguyên tử hydro trong từ trường khi viết trong hệ đơn vị nguyên tử có dạng:

$$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi, \quad \hat{H} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{i}{2}\gamma\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)+\frac{1}{8}\gamma^2\left(x^2+y^2\right)-\frac{Z}{r}, \qquad (1)$$

với: $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$; đơn vị độ dài là bán kính Bohr $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/me^2 = 0.529\,\overset{0}{\text{A}}$; đơn vị năng lượng là hai lần hằng số Rydberg $R_y = \hbar^2/2ma_0^2 = 13.61\text{eV}$; tham số từ trường không thứ nguyên là γ liên hệ với từ trường qua hệ thức $B = 2mR_y\gamma/e\hbar$ với $\gamma = 1$ ứng với từ trường $B = 2.35\times10^9\text{G}$, Z là điện tích hạt nhân của nguyên tử hydro, trong bài báo này $Z = 1$.

Thực hiện phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel:

$$\begin{cases} x = 2\left(u_1u_2+v_1v_2\right), \\ y = 2\left(u_1v_2-u_2v_1\right), \\ z = u_1^2-u_2^2+v_1^2-v_2^2, \\ \phi = \arctan\dfrac{v_1}{u_1}+\arctan\dfrac{v_2}{u_2}\ ,\ 0\le\phi\le2\pi, \end{cases} \qquad (2)$$

trong đó, biến số góc ϕ được đưa vào như biến tọa độ thứ tư để thuận tiện cho tính toán khi chuyển sang hệ tọa độ mới. Vì góc ϕ không có ý nghĩa vật lí mà chỉ được đưa vào để tương xứng với không gian bốn chiều nên hàm sóng trong phương trình Schrödinger không phụ thuộc vào ϕ: $\dfrac{\partial\Psi}{\partial\phi}=0$, tương ứng với phương trình trong không gian (u,v):

$$\left(u_1\frac{\partial}{\partial v_1}-v_1\frac{\partial}{\partial u_1}+u_2\frac{\partial}{\partial v_2}-v_2\frac{\partial}{\partial u_2}\right)\psi\left(u_1,u_2,v_1,v_2\right)=0. \qquad (3)$$

Để bảo toàn tính hermit của Hamiltonian khi chuyển tọa độ, ta phải nhân thêm vào hai vế của (1) thừa số ứng với Jacobian $J = 2r$ của phép biến đổi tọa độ (2):

$$r\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = r\varepsilon\psi(\mathbf{r}). \qquad (4)$$

Từ (2) suy ra:

$$\begin{aligned} &x^2+y^2 = 4\left(u_1^2+v_1^2\right)\left(u_2^2+v_2^2\right), \\ &r = u_1^2+v_1^2+u_2^2+v_2^2, \\ &r\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = \frac{1}{4}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial u_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial v_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial v_2^2}\right), \end{aligned} \qquad (5)$$

$$\hat{l}_z = -\frac{i}{2}\left(v_1 \frac{\partial}{\partial u_1} - u_1 \frac{\partial}{\partial v_1} + u_2 \frac{\partial}{\partial v_2} - v_2 \frac{\partial}{\partial u_2} \right).$$

Phương trình (1) được viết lại như sau:

$$\begin{aligned} &\left\{ -\frac{1}{8}\Delta_{u_1u_2} - \frac{1}{8}\Delta_{v_1v_2} - \left(\varepsilon - \frac{1}{2}\gamma \hat{l}_z \right)\left(u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2 \right) \right. \\ &\qquad \left. + \frac{1}{2}\gamma^2 \left(u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2 \right)\left(u_1^2 + v_1^2 \right)\left(u_2^2 + v_2^2 \right) - Z \right\} \psi\left(u_1, u_2, v_1, v_2 \right) = 0, \end{aligned} \tag{6}$$

trong đó:

$$\Delta_{u_1u_2} = \frac{\partial^2}{\partial u_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial u_2^2},\ \Delta_{v_1v_2} = \frac{\partial^2}{\partial v_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial v_2^2}. \tag{7}$$

Hai phương trình (1) và (6) là hoàn toàn tương đương nhau nếu hàm sóng $\psi\left(u_1, u_2, v_1, v_2 \right)$ thỏa mãn điều kiện (3); tuy nhiên, phương trình (6) đơn giản hơn về mặt cấu trúc, có thể sử dụng phương pháp tính toán đại số.

Do toán tử $\hat{l}_z$ giao hoán với Hamiltonian trong phương trình (6), nên hàm riêng của Hamiltonian trong phương trình (6) cũng là hàm riêng của của toán tử $\hat{l}_z$ và bài toán đang xét có sự bảo toàn moment động lượng quỹ đạo. Gọi m là trị riêng của toán tử $\hat{l}_z$, phương trình (6) có thể viết lại như sau:

$$\left(\hat{H} - Z \right)\psi\left(u_1, u_2, v_1, v_2 \right) = 0, \tag{8}$$

với:

$$\begin{aligned} \hat{H} = &-\frac{1}{8}\Delta_{u_1u_2} - \frac{1}{8}\Delta_{v_1v_2} - \left(\varepsilon - \frac{1}{2}\gamma m \right)\left(u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2 \right) \\ &+ \frac{1}{2}\gamma^2 \left(u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2 \right)\left(u_1^2 + v_1^2 \right)\left(u_2^2 + v_2^2 \right). \end{aligned} \tag{9}$$

Phương trình (8) là phương trình Schrödinger của dao động tử phi điều hòa bốn chiều.

Như vậy, thông qua phép biến đổi Kustaanheimo-Stiefel, phương trình Schrödinger cho nguyên tử hydro ba chiều trong từ trường đều đã trở thành phương trình Schrödinger của dao động tử phi điều hòa bốn chiều. Cần lưu ý là Z bây giờ đóng vai trò là trị riêng và ε trở thành một tham số của phương trình (8). Điều này không ảnh hưởng đến việc sử dụng FK-OM để tìm nghiệm chính xác bằng số của phương trình (8), sẽ được trình bày rõ trong các phần sau.

3. Phương pháp toán tử FK

FK-OM giải phương trình Schrödinger cho bài toán dao động tử phi điều hòa (8) sẽ được thực hiện qua các bước sau: (1) Biểu diễn Hamiltonian qua các toán tử sinh hủy $\hat{H}\left(u_1,u_1,v_1,v_2;\gamma\right)\to\hat{H}\left(\hat{a}_1,\hat{a}_1^+,\hat{a}_2,\hat{a}_2^+,\hat{b}_1,\hat{b}_1^+,\hat{b}_2,\hat{b}_2^+;\gamma\right)$; (2) Tách Hamiltonian ở trên thành hai thành phần: thành phần trung hòa $\hat{H}_0(\hat{a}_1^+\hat{a}_1,\hat{a}_2^+\hat{a}_2,\hat{b}_1^+\hat{b}_1,\hat{b}_2^+\hat{b}_2;\gamma)$ và thành phần còn lại xem như là nhiễu loạn $\hat{V}$; (3) Giải phương trình $\hat{H}_0\Psi_n^{(0)}=E_n^{(0)}\Psi_n^{(0)}$ để tìm nghiệm gần đúng bậc không; (4) Giải phương trình hàm riêng, trị riêng của ma trận Hamiltonian để thu được nghiệm số với độ chính xác cho trước.

Các bước đã mô tả ở trên được thực hiện cụ thể như sau:

Bước 1. *Viết Hamiltonian dưới dạng đại số*

Các toán tử sinh hủy được dùng trong bài toán nguyên tử hydro trong từ trường tuân theo các định nghĩa như sau:

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

trong đó, ω là tham số tự do được đưa vào để tối ưu hóa quá trình tính toán, các giao hoán tử của các biểu thức (10) thỏa:

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

Kết hợp (5) và (10), ta viết được: $\hat{l}_z=-\dfrac{i}{2}\left(\alpha_1\beta_1^+-\alpha_1^+\beta_1+\alpha_2^+\beta_2-\alpha_2\beta_2^+\right)$.

Toán tử $\hat{l}_z$ vừa thu được không có dạng chéo hóa, để chéo hóa $\hat{l}_z$ chúng tôi sử dụng các toán tử sinh, hủy mới như sau:

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

Thay (12) vào (9), chúng tôi có được dạng đại số của Hamiltonian:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\omega}{4}\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 2 - \hat{a}_1\hat{b}_1 - \hat{a}_2\hat{b}_2 - \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ - \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+\right) \\ &+ \frac{1}{2\omega}\left(\frac{\gamma m}{2} - \varepsilon\right)\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 2 + \hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_2\hat{b}_2 + \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+\right) \\ &+ \frac{\gamma^2}{16\omega^3}\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 2 + \hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_2\hat{b}_2 + \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+ + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+\right) \\ &\quad \text{x}\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + 1 + \hat{a}_1\hat{b}_1 + \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+\right)\left(\hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1 + \hat{a}_2\hat{b}_2 + \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+\right),\end{aligned} \tag{13}$$

và dạng đại số của toán tử $\hat{l}_z$:

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

Để đơn giản hóa bài toán, chúng tôi dùng hệ thống các toán tử mới:

$$\hat{N}_1 = \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1,\ \hat{N}_2 = \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2,\ \hat{M}_1^+ = \hat{a}_1^+\hat{b}_1^+,\ \hat{M}_2^+ = \hat{a}_2^+\hat{b}_2^+. \tag{15}$$

Các toán tử này thỏa các hệ thức sau:

$$\left[\hat{M}_1, \hat{M}_1^+\right] = \hat{N}_1 + 1,\ \left[\hat{M}_1, \hat{N}_1 + 1\right] = 2\hat{M}_1,\ \left[\hat{N}_1 + 1, \hat{M}_1^+\right] = 2\hat{M}_1^+. \tag{16}$$

Hamiltonian (13) được biểu diễn qua các toán tử (15) như sau:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\omega}{4}\left(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + 2 - \hat{M}_1 - \hat{M}_2 - \hat{M}_1^+ - \hat{M}_2^+\right) \\ &+ \frac{1}{2\omega}\left(\frac{\gamma m}{2} - \varepsilon\right)\left(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + 2 + \hat{M}_1 + \hat{M}_2 + \hat{M}_1^+ + \hat{M}_2^+\right) \\ &+ \frac{\gamma^2}{16\omega^3}\left(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + 2 + \hat{M}_1 + \hat{M}_2 + \hat{M}_1^+ + \hat{M}_2^+\right)\left(\hat{N}_1 + 1 + \hat{M}_1 + \hat{M}_1^+\right)\left(\hat{N}_2 + 1 + \hat{M}_2 + \hat{M}_2^+\right).\end{aligned} \tag{17}$$

Bước 2. *Tách Hamiltonian (17) thành hai thành phần*

Theo bước 2 của FK-OM đã trình bày ở trên, cần phải tách riêng toán tử trung hòa $\hat{H}_0$ và toán tử nhiễu loạn $\hat{V}$ từ Hamiltonian (17). Tuy nhiên, bằng cách chọn bộ hàm sóng cơ sở là hàm riêng của dao động tử điều hòa bốn chiều ứng với các toán tử sinh hủy (12), việc tách Hamiltonian (17) không còn cần thiết nữa vì bộ hàm sóng cơ sở cũng chính là hàm riêng của $\hat{H}_0$.

Bộ hàm cơ sở dưới dạng hàm riêng của dao động tử điều hòa bốn chiều được viết như sau:

$$\left|n_1 n_2 n_3 n_4(\omega)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!\,n_2!\,n_3!\,n_4!}}\left(\hat{a}_1^+\right)^{n_1}\left(\hat{a}_2^+\right)^{n_2}\left(\hat{b}_1^+\right)^{n_3}\left(\hat{b}_2^+\right)^{n_4}\left|0(\omega)\right\rangle, \tag{18}$$

với: $n_i = 0,1,2,...(i = \overline{1,4})$.

Bộ hàm cơ sở (18) có tính trực giao và được chuẩn hóa từ điều kiện:

$$\hat{a}_s(\omega)\left|0(\omega)\right\rangle = 0;\ \ \hat{b}_s(\omega)\left|0(\omega)\right\rangle = 0;\ \ \left\langle 0(\omega)\right|\left.0(\omega)\right\rangle = 1. \tag{19}$$

Do $\hat{l}_z$ được bảo toàn nên hàm riêng của Hamiltonian trong phương trình (8) cũng là hàm riêng của của $\hat{l}_z$:

$$\hat{l}_z\left|n_1n_2n_3n_4(\omega)\right\rangle = \frac{n_1 - n_3 + n_4 - n_2}{2}\left|n_1n_2n_3n_4(\omega)\right\rangle, \tag{20}$$

khi đó ta có:

$$n_1 - n_3 + n_4 - n_2 = 2m, \tag{21}$$

với m là trị riêng của $\hat{l}_z$.

Mặt khác, từ điều kiện tự do của biến số ϕ, ta có:

$$\left(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 - \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{b}_1^+\hat{b}_1 - \hat{b}_2^+\hat{b}_2\right)\left|n_1n_2n_3n_4(\omega)\right\rangle = \left(n_1 - n_3 + n_2 - n_4\right)\left|n_1n_2n_3n_4(\omega)\right\rangle = 0, \tag{22}$$

hay:

$$n_1 + n_2 = n_4 + n_3. \tag{23}$$

Bộ hàm cơ sở mới thỏa các điều kiện (18), (21), (23) có dạng:

$$\left|n_1, n_2, m\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!\left(n_1 + \left|m\right|\right)!\left(n_2 + \left|m\right|\right)!}}\left(\hat{M}_1^+\right)^{n_1}\left(\hat{M}_2^+\right)^{n_2}\left|00m\right\rangle, \tag{24}$$

trong đó: $\left|m\right\rangle = \left(\hat{b}_1^+\hat{b}_2^+\right)^{|m|}\left|0\right\rangle$ khi $m \geq 0$ và $\left|m\right\rangle = \left(\hat{a}_1^+\hat{a}_2^+\right)^{|m|}\left|0\right\rangle$ khi $m < 0$.

Bộ hàm cơ sở (24) là bộ hàm đối xứng trụ với:

$$n = n_1 + n_2 + \left|m\right|, \tag{25}$$

là số lượng tử chính $(n = \left|m\right|, \left|m\right| + 1, ...)$, trong đó m là số lượng tử từ $\left(m = 0, \pm1, \pm2, ...\right)$, n_1 và n_2 là các số nguyên lớn hơn hoặc bằng không. Chúng liên quan đến số lượng tử quỹ đạo l theo công thức:

$$l = 2n_2 + \left|m\right|. \tag{26}$$

Biểu thức (26) cho thấy, $\left|m\right|$ là số chẵn thì l chẵn, $\left|m\right|$ là số lẻ thì l lẻ và $\left|m\right| \leq l$. Khi đổi chỗ n_1 và n_2 thì bộ hàm cơ sở (24) không thay đổi dạng, nên ta có thể viết bộ hàm cơ sở dưới dạng đối xứng và phản đối xứng sau:

$$\begin{aligned}
\left|n_1, n_2, m\right\rangle^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|n_1, n_2, m\right\rangle + \left|n_2, n_1, m\right\rangle\right);\ n_1 \geq n_2, \\
\left|n_1, n_2, m\right\rangle^- &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|n_1, n_2, m\right\rangle - \left|n_2, n_1, m\right\rangle\right);\ n_1 > n_2.
\end{aligned} \tag{27}$$

Nếu chọn bộ hàm cơ sở của bài toán là bộ hàm ở (27) thì: $l \le n$.

Sau khi có bộ hàm cơ sở, chúng tôi tính các yếu tố ma trận của Hamiltonian (17). Yếu tố ma trận này có thể viết tường minh như sau:

$$H_{j_1 j_2, k_1 k_2} = \frac{\omega}{4} D_{j_1 j_2, k_1 k_2} + \frac{1}{2\omega}\left(\frac{\gamma m}{2} - \varepsilon\right) R_{j_1 j_2, k_1 k_2} + \frac{\gamma^2}{16\omega^3} K_{j_1 j_2, k_1 k_2}, \tag{28}$$

trong đó:

$$\begin{aligned}
D_{j_1 j_2, k_1 k_2} &= \left\langle j_1 j_2 m \middle| \left(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + 2 - \hat{M}_1 - \hat{M}_2 - \hat{M}_1^+ - \hat{M}_2^+ \right) \middle| k_1 k_2 m \right\rangle, \\
R_{j_1 j_2, k_1 k_2} &= \left\langle j_1 j_2 m \middle| \left(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + 2 + \hat{M}_1 + \hat{M}_2 + \hat{M}_1^+ + \hat{M}_2^+ \right) \middle| k_1 k_2 m \right\rangle, \\
K_{j_1 j_2, k_1 k_2} &= \left\langle j_1 j_2 m \middle| \left(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + 2 + \hat{M}_1 + \hat{M}_2 + \hat{M}_1^+ + \hat{M}_2^+ \right) \right. \\
&\quad \left. \mathrm{x} \left(\hat{N}_1 + 1 + \hat{M}_1 + \hat{M}_1^+ \right) \left(\hat{N}_2 + 1 + \hat{M}_2 + \hat{M}_2^+ \right) \middle| k_1 k_2 m \right\rangle.
\end{aligned} \tag{29}$$

Các kết quả tính cho thấy, ma trận **D**, **R** là ma trận có năm đường chéo, ma trận **K** là ma trận có 21 đường chéo, các phần tử khác bằng không. Điều này thuận lợi cho việc giải phương trình tìm nghiệm số ở bước sau.

Bước 3. *Tìm nghiệm gần đúng bậc không*

Năng lượng gần đúng bậc không cho các trạng thái lượng tử là:

$$\varepsilon^{(0)}_{k_1 k_2 m} = \frac{\omega^2}{2} + \frac{\gamma m}{2} + \frac{\gamma^2}{8\omega^2}\left[3\left(k_1 + k_2\right)\left(|m| + 1\right) + |m|\left(|m| + 3\right) + 6k_1 k_2 + 2\right] - \frac{Z\omega}{k_1 + k_2 + |m| + 1}. \tag{30}$$

Trong trường hợp từ trường nhỏ $\gamma \ll \omega$, biểu thức này trở thành:

$$\varepsilon^{(0)}_{k_1 k_2 m} = \frac{\omega^2}{2} + \frac{\gamma m}{2} - \frac{Z\omega}{n+1}, \tag{31}$$

với ω được xác định từ điều kiện: $\dfrac{\partial \varepsilon^{(0)}_{k_1 k_2 m}}{\partial \omega} = 0$ [1, tr. 270]. Ta thu được:

$$\omega = \frac{Z}{n+1}; \quad \varepsilon^{(0)}_{k_1 k_2 m} = -\frac{Z^2}{2\left(n+1\right)^2} + \frac{\gamma m}{2}. \tag{32}$$

Biểu thức (32) cho phép tìm nghiệm gần đúng bậc không của nguyên tử hydro trong từ trường.

Để tìm nghiệm gần đúng của các bậc lớn hơn không của nguyên tử hydro trong từ trường, chúng tôi tính thêm các bổ chính cho năng lượng và hàm sóng như trong lí thuyết nhiễu loạn. Từ trường có cường độ càng lớn thì cần thực hiện tính toán với các bậc bổ chính càng cao để thu được nghiệm với độ chính xác mong muốn .

Bước 4. *Giải phương trình trị riêng, vector riêng của ma trận Hamiltonian để thu được nghiệm chính xác bằng số.*

Trong các công trình khác của nhóm, các tác giả đã sử dụng phương pháp toán tử FK và sơ đồ vòng lặp cùng các chương trình tính số phù hợp để giải quyết bài toán và thu kết quả. Trong công trình này, chúng tôi tính trực tiếp bằng cách chéo hóa ma trận Hamiltonian tương ứng.

Trước tiên chúng tôi biểu diễn hàm riêng của phương trình (8) theo dạng tổ hợp tuyến tính của bộ hàm cơ sở đối xứng.

$$\psi^{+(\mathrm{s})} = \sum_{n=|m|}^{s} \sum_{k_1=0}^{n-|m|} C^{(\mathrm{s})}_{k_1,n-k_1-|m|} \left| k_1, n-k_1-|m|, m \right\rangle^{+},$$

$$\psi^{-(\mathrm{s})} = \sum_{n=|m|}^{s} \sum_{k_1=0}^{n-|m|} C^{(\mathrm{s})}_{k_1,n-k_1-|m|} \left| k_1, n-k_1-|m|, m \right\rangle^{-}, \tag{33}$$

$$k_2 = n-k_1-|m|,$$

với s là bậc bổ chính. Khi bậc bổ chính $s \to \infty$ thì $\psi^{(\infty)}_{n,k,m} = \psi_{n,k,\mathrm{m}}$ là hàm riêng chính xác của Hamiltonian trong phương trình (8). Tuy nhiên, trong giải chính xác bằng số thì chúng tôi chọn s là số hữu hạn đủ lớn để sai số của trị riêng $\left|\varepsilon^{(s)} - \varepsilon^{(s-1)}\right| < \Delta\varepsilon^{(\mathrm{s})}$, $\Delta\varepsilon^{(\mathrm{s})}$ cho trước.

Thay hàm riêng (33) vào phương trình (8), ta được phương trình hàm riêng trị riêng của ma trận Hamiltonian trong (8):

$$\left(\mathbf{H^R} - Z\right)\mathbf{X} = \left(\varepsilon - \frac{\gamma m}{2}\right)\frac{1}{2\omega}\mathbf{R}\mathbf{X}, \tag{34}$$

với: $\mathbf{H^R}$ là ma trận vuông có các yếu tố ma trận là:

$$H^{R}{}_{j_1 j_2, k_1 k_2} = \frac{\omega}{4} D_{j_1 j_2, k_1 k_2} + \frac{\gamma^2}{16\omega^3} K_{j_1 j_2, k_1 k_2}, \tag{35}$$

và $\mathbf{R}$ là ma trận vuông có các yếu tố ma trận $R_{j_1 j_2, k_1 k_2}$ đã biết trong biểu thức (29), $\mathbf{X}$ là hàm riêng, Z là trị riêng, ở đây $Z = 1$ như đã nói trong phần trên.

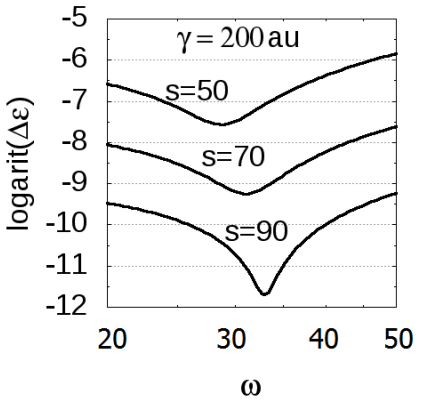
Chương trình tính được viết bằng ngôn ngữ FORTRAN, kết hợp sử dụng thư viện Intel® Math Kernel Library (Intel® MKL), chúng tôi giải chính xác bằng số phương trình (34), tìm phổ năng lượng, hàm sóng của nguyên tử hydro trong từ trường đều với độ sai số $\Delta\varepsilon^{(\mathrm{s})}$ cho trước. Kết quả tính số có độ chính xác từ 7 đến 15 chữ số, sẽ được thảo luận ở phần sau.

3. Kết quả và thảo luận

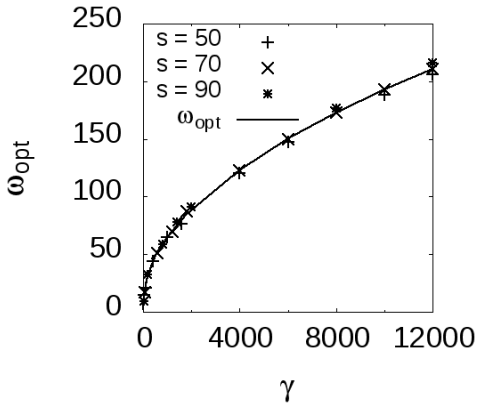
3.1. Vai trò của tham số tự do ω

Tham số tự do ω đóng vai trò rất quan trọng trong quá trình tìm nghiệm chính xác bằng số của phương trình (35), với cùng một giá trị của cường độ từ trường ngoài, các giá trị khác nhau của tham số ω cho tốc độ hội tụ khác nhau. Tuy giá trị của ω có thể chọn từ điều kiện $\partial\varepsilon^{(0)}_{k_1k_2m}/\partial\omega = 0$, là điều kiện được viết trong gần đúng bậc không theo ý nghĩa là năng lượng của bài toán không phụ thuộc vào giá trị của tham số ω, nhưng kết quả tính số cho thấy giá trị ω được chọn theo điều kiện này chưa tối ưu, khi cường độ từ trường ngoài càng lớn thì giá trị ω này càng xa với giá trị tối ưu của tham số tự do. Trong công trình này, ω được chọn tùy ý sao cho tốc độ hội tụ của bài toán là nhanh nhất và kết quả tính số đạt độ chính xác cao nhất. Chúng tôi nhận thấy rằng ứng với mỗi giá trị của tham số từ trường γ có một vùng giá trị của tham số tự do ω làm cho nghiệm chính xác bằng số hội tụ nhanh nhất về giá trị chính xác, chúng tôi gọi là "*miền giá trị tối ưu* ω_{opt}". Nếu chọn tham số tự do trong miền giá trị ω_{opt}, bậc bổ chính được giảm tối thiểu nên thời gian tính toán được rút ngắn và tài nguyên của máy tính cũng sẽ được tiết kiệm tối đa.

Để minh họa, chúng tôi xét một trường hợp cụ thể là trường hợp $\gamma = 200 a.u.$, sự phụ thuộc của ω vào logarit của sai số trong trường hợp này được mô tả trong Hình 1. Hình 1 cho thấy vùng omega tối ưu ứng với $s = 50$ là $\omega^{(50)}_{opt} = 30.0 \pm 1.6$; ứng với $s = 70$ là $\omega^{(70)}_{opt} = 30.3 \pm 1.5$; và ứng với $s = 90$ là $\omega^{(90)}_{opt} = 32.6 \pm 1.6$. Sự phụ thuộc của giá trị ω_{opt} vào từ trường γ được mô tả trong Hình 2. Hình 2 cho thấy khi bậc bổ chính thay đổi từ 50 đến 90 thì luôn có một vùng "giao cắt" giữa các vùng giá trị ω_{opt} tương ứng, và giá trị của ω có thể được chọn lựa từ vùng ω_{opt} này để rút ngắn thời gian tính toán đến mức tối ưu.



Hình 1. *Sự phụ thuộc của ω vào logarit của sai số $\Delta\varepsilon$ trong trường hợp γ = 200 a.u*



Hình 2. *Sự phụ thuộc của tham số tự do tối ưu ω_{opt} vào từ trường γ ở trạng thái cơ bản*

Các kết quả khảo sát tham số tự do tối ưu ω_{opt} được tích hợp vào chương trình tính tự động được viết bằng ngôn ngữ FORTRAN.

3.2. Năng lượng trạng thái cơ bản

Để khảo sát năng lượng của trạng thái cơ bản, chúng tôi xác định giá trị ω_{opt} ứng với mỗi giá trị của tham số từ trường γ và thay đổi số bậc bổ chính để tìm nghiệm bằng số chính xác của năng lượng liên kết E_b tương ứng với từng giá trị cụ thể của γ. Để tiện việc so sánh với các tác giả khác, chúng tôi sử dụng định nghĩa về năng lượng liên kết như sau: $E_b = \gamma - 2\varepsilon$. Các kết quả tính số của chúng tôi đạt độ chính xác từ 7 đến 15 chữ số, thể hiện trong Bảng 1. Từ các số liệu so sánh trong bảng, có thể thấy được nghiệm thu được bởi FK-OM cho phép thu được nghiệm với độ chính xác cao hơn các công trình trước đó; đồng thời, phương pháp cũng cho phép xác định năng lượng trong vùng từ trường siêu cao – là vùng có ý nghĩa ứng dụng, đáp ứng được nhu cầu của thực nghiệm [4].

Bảng 1. *Năng lượng liên kết của nguyên tử hydro ở trạng thái cơ bản*

γ	E_b	ref[8]	ref[7]	ref[2]	ref[5]
0.02	1.01980008817880			1.01981	1.0198002
0.04	1.03920140353701			1.03921	1.0392012
0.10	1.09505296080219	1.09505296	1.09505296	1.09511	1.0950533
0.14	1.13039620598641			1.13041	1.1303963
0.20	1.18076313006953			1.18081	1.1807633
0.40	1.32921075973643			1.32931	1.3292114
1.00	1.66233779346632	1.662332	1.66233779	1.66241	1.6623387
1.40	1.83233152537548			1.83240	1.8323329
2.00	2.0444278153302			2.04452	2.0444281
4.00	2.5615960321042			2.56163	2.5615961
10.00	3.4955943274362	3.4948	3.49559433	3.49565	3.4955942
14.00	3.922425139980			3.92256	3.9224252
20.00	4.430797030878			4.43081	4.4307972
100.00	7.579608472	7.564	7.57960847		
400.00	11.703302320				11.70230
1000.00	15.3248464	15.23	15.32484649		
2000.00	18.609529440				18.60896
4000.00	22.408240				22.40829
10000.00	28.27800	27.96			
40000.00	38.81758				
100000.00	44.90045				

4. Kết luận

Trong công trình này, chúng tôi đã áp dụng thành công FK-OM kết hợp với phép biến đổi Kustaanheimo – Stiefel để tìm nghiệm chính xác bằng số cho trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro trong từ trường đều với độ chính xác bất kì. Chúng tôi cũng xây dựng được chương trình tính toán tự động trên ngôn ngữ lập trình FORTRAN, trong đó đã tích hợp kết quả khảo sát để chọn vùng giá trị tối ưu của tham số tự do ω nhằm thu được nghiệm cho bài toán với tốc độ cao, cho phép chúng tôi thu được năng lượng cơ bản cho nguyên tử hydro trong miền biến đổi của từ trường từ không đến siêu cao (2.35×10^{14}G), với độ chính xác cao (độ chính xác tương đối là 10^{-15} cho vùng từ trường yếu và trung bình, 10^{-7} cho vùng từ trường cao và siêu cao). Kết quả này là một sự mở rộng đáng kể so với các số liệu thu trước đây, cả về độ chính xác lẫn miền giá trị của từ trường, đặc biệt là trong vùng từ trường siêu cao có nhiều ứng dụng. Nghiên cứu này cũng có ý nghĩa trong việc phát triển phương pháp cho các trạng thái kích thích của bài toán cũng như cho việc mở rộng các nguyên tử có nhiều điện tử hơn.

Ghi chú: *Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển Khoa học và Công nghệ Quốc gia (NAFOSTED,) trong đề tài mã số 103.01-2014.44*; *PGS TSKH Lê Văn Hoàng đã đặt vấn đề cho nghiên cứu và hướng dẫn chúng tôi trong quá trình thực hiện công trình.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Feranchuk, I. D., Ivanov A., Le, Van-Hoang & A. Ulyanhenkov (2015), *Nonperturbative description of quantum systems*, Springer - Switzerland.
2. Thirumalai, A. and Heyl, J. S. (2009), "Hydrogen and Helium atoms in strong magnetic fields", *Phys. Rev. A* **79** (012514), pp. 1-13.
3. Gani, V.A. et al. (2003), "A Hydrogen Atom in a Superstrong Magnetic Field and the Zeldovich Effect", *J. Exp. Theor. Phys.* **96**, pp. 890–914.
4. Rudel, H., Wagner, G., Herold, H. & Geyer, F. (1994), *Atoms in Strong Magnetic Fields*, Springer - Verlag, Berlin.
5. Rösner, W., Gunner, G., Harold, H. & Ruder, H. (1984), "Hydrogen atoms in arbitrary magnetic field:. I. Energy levels and wave functions", *J. Phys. B* **17**, pp. 29-52.
6. Hoang, D. Ngoc-Tram, Nguyen, P. Duy-Anh, Hoang, Van-Hung & Le, Van-Hoang (2016), "Highly accurate analytical energy of a two-dimensional exciton in a constant magnetic field", *Physica B* **495**, pp. 16-20.

7. Kravchenko, Yu. P., Lieberman, M. A. & Johansson, B. (1996), "Exact Solution for a Hydrogen atom in a magnetic field of arbitrary strength", *Phys. Rev. A* **54**, pp. 287-305.

8. López Vieyra, J. C. & Pilón, H. O. (2007), "Hydrogen atom in a magnetic field: electromagnetic transitions of the lowest states", *Rev. Mex. Fis.* **54**, pp. 49-57.

9. Sasmal, G. P. (2014), "On computation for a hydrogen atom in arbitrary magnetic fields using finite volume method", *J. At. Mol. Sci* **5**, pp. 187-205.

10. Schmelcher, P. & Schweizer, W. (2002), *Atoms and Molecules in Strong External Fields*, Kluwer Academic Publisher.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 12-10-2016; ngày phản biện đánh giá: 21-11-2016, ngày chấp nhận đăng: 16-12-2016)