

PHƯƠNG PHÁP TOÁN TỬ FK CHO BÀI TOÁN NGUYÊN TỬ HYDRO TRONG TỪ TRƯỜNG VỚI CƯỜNG ĐỘ BẤT KÌ

LÝ DUY NHẤT*, HUỖNH NGUYỄN THANH TRÚC**,
NGUYỄN VĂN HOA***, NGUYỄN PHƯƠNG DUY ANH****, LÊ VĂN HOÀNG*****

TÓM TẮT

Bằng cách sử dụng phép biến đổi Laplace chúng tôi áp dụng được phương pháp toán tử FK để tính năng lượng và hàm sóng cho nguyên tử hydro trong từ trường với cường độ bất kì. Dùng sơ đồ vòng lặp để tính các bổ chính bậc cao và so sánh các kết quả với kết quả của các tác giả khác. Với trạng thái cơ bản và các trạng thái kích thích bậc thấp chuỗi các bổ chính hội tụ cho nghiệm chính xác bằng số.

Từ khóa: phương pháp toán tử FK, phương trình Schrodinger, nguyên tử hydro, từ trường.

ABSTRACT

The FK operator method for the problem of a hydrogen atom in a magnetic field of arbitrary intensity

By using the Laplace transformation we apply the FK operator method for calculating energies and wavefunctions of a hydrogen atom in a magnetic field of arbitrary intensity. The high-order corrections are calculated by this method with an iterative scheme and compared to the others. In the case of original and low-excited states, convergent correction series allow us to obtain exact numerical solutions.

Keywords: FK operator method, Schrodinger equation, hydrogen atom, magnetic field.

1. Mở đầu

Kể từ năm 1896, khi Zeeman phát hiện ra sự tách quang phổ vạch của nguyên tử trong từ trường, phổ năng lượng của nguyên tử có sự hiện diện của từ trường đã thu hút sự quan tâm của rất nhiều nhà khoa học [8], [7]. Bài toán này, liên quan mật thiết đến việc nghiên cứu cấu trúc và phổ nguyên tử trong từ trường mạnh ở các sao lùn trắng, sao neutron [7]. Bài toán nguyên tử hydro trong từ trường có thể được giải bằng nhiều phương pháp gần đúng như: phương pháp nhiễu loạn, biến phân [5], gần đúng Hartree-Fock [8]. Đặc biệt phương pháp toán tử, được đưa ra đầu tiên vào năm 1982 bởi một nhóm các giáo sư ở trường đại học Belarus [4] và ứng dụng thành công cho một nhóm

* HVCH, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

** HVCH, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

*** TS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

**** ThS, Trường Đại học Thủ Dầu Một

***** PGS TSKH, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

rộng rãi các bài toán, cho phép giải phương trình Schrodinger cho hệ phi nhiễu loạn. Chính vì vậy, việc vận dụng phương pháp này cho bài toán nguyên tử hydro trong từ trường với cường độ bất kỳ là quan trọng và có ý nghĩa khoa học. Bài toán này đã được nghiên cứu bằng phương pháp toán tử FK nhưng chỉ cho bổ chính đến bậc 2 [2], hay khảo sát nghiệm chính xác bằng số cho trạng thái cơ bản. [1]

Trong công trình này, chúng tôi sẽ sử dụng phép biến đổi Laplace thay vì phép biến đổi không gian Kustaanheimo-Stiefel [2] để có thể áp dụng phương pháp toán tử FK. Năng lượng và hàm sóng được tính cho trạng thái cơ bản và một số trạng thái kích thích đầu tiên.

2. Xây dựng bộ hàm cơ sở

Ta định nghĩa các toán tử

$$\hat{a}_j = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x_j + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \right), \quad \hat{a}_j^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x_j - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \right), \quad (1)$$

$$\text{thỏa mãn các hệ thức giao hoán: } [\hat{a}_j, \hat{a}_k^+] = \delta_{jk}, \quad (2)$$

trong đó $j, k = 1, 2, 3$ tương ứng với 3 trục Ox, Oy, Oz; ω là tham số thực dương. Để tiện sử dụng ta kí hiệu:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \hat{a}_1^2 + \hat{a}_2^2, & \hat{A}^+ &= \hat{a}_1^{+2} + \hat{a}_2^{+2}, & \hat{N} &= \hat{a}_1^+ \hat{a}_1 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 + 1, \\ \hat{A}_3 &= \hat{a}_3^2, & \hat{A}_3^+ &= \hat{a}_3^{+2}, & \hat{N}_3 &= \hat{a}_3^+ \hat{a}_3. \end{aligned} \quad (3)$$

Để dàng kiểm chứng các giao hoán tử sau:

$$[\hat{A}, \hat{A}^+] = 4\hat{N}, \quad [\hat{A}, \hat{N}] = 2\hat{A}, \quad [\hat{N}, \hat{A}^+] = 2\hat{A}^+. \quad (4)$$

Ta đặt thêm các toán tử:

$$\hat{a}_{12+}^+ = \hat{a}_1^+ + i\hat{a}_2^+, \quad \hat{a}_{12-}^+ = \hat{a}_1^+ - i\hat{a}_2^+, \quad \hat{a}_{12+} = \hat{a}_1 - i\hat{a}_2, \quad \hat{a}_{12-} = \hat{a}_1 + i\hat{a}_2, \quad \hat{l}_3 = i(\hat{a}_2^+ \hat{a}_1 - \hat{a}_1^+ \hat{a}_2) \quad (5)$$

thỏa mãn các hệ thức giao hoán:

$$[\hat{a}_{12+}, \hat{a}_{12+}^+] = 2, \quad [\hat{a}_{12+}, \hat{a}_{12-}^+] = 0, \quad [\hat{a}_{12-}, \hat{a}_{12+}^+] = 0, \quad [\hat{a}_{12+}^+, \hat{l}_3] = -\hat{a}_{12+}^+, \quad [\hat{a}_{12-}^+, \hat{l}_3] = \hat{a}_{12-}^+. \quad (6)$$

Ở đây, $\hat{l}_3 = -ix \frac{\partial}{\partial y} + iy \frac{\partial}{\partial x}$ chính là toán tử hình chiếu mô-men động lượng quỹ đạo

lên trục Oz, hàm riêng của nó có thể xây dựng được:

$$|\pm m\rangle = \frac{1}{2^{m/2} \sqrt{m!}} (\hat{a}_{12\pm}^+)^m |0\rangle \quad (7)$$

với $m = 0, 1, 2, \dots$ là số nguyên không âm.

Ta có thể xây dựng một bộ hàm cơ sở (đủ, trực giao và chuẩn hóa) có hình chiếu mô-men động lượng quỹ đạo xác định như sau:

$$|n_1 n_2, \pm m\rangle = \sqrt{\frac{m!}{2^{2n_1} n_1! (2n_2)! (m+n_1)!}} \hat{A}^{+n_1} \hat{A}_3^{+n_2} |\pm m\rangle, \quad (8)$$

với định nghĩa số lượng tử chính: $n = n_1 + n_2 + m$.

3. Phương pháp toán tử cho bài toán nguyên tử hydro trong từ trường

Phương trình Schrödinger của nguyên tử hydro trong từ trường theo hệ đơn vị nguyên tử:

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{Z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} + \frac{1}{2} \gamma \hat{l}_3 + \frac{1}{8} \gamma^2 (x^2 + y^2) \quad (10)$$

trong đó Z là điện tích. Biểu diễn $\hat{H}$ qua các toán tử sinh, hủy:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\omega}{4} (\hat{A}^+ + \hat{A} - \hat{N} + \hat{A}_3^+ + \hat{A}_3 - \hat{N}_3) + \frac{\gamma}{2} \hat{l}_3 + \frac{\gamma^2}{16\omega} (\hat{A}^+ + \hat{A} + \hat{N}) \\ & - \frac{\sqrt{2\omega Z}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} dt \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-t(\hat{A}^+ + \hat{A} + \hat{N})} e^{-t(\hat{A}_3^+ + \hat{A}_3 + \hat{N}_3)} \end{aligned} \quad (11)$$

Trong đó thành phần thế năng có thể đưa về dạng chuẩn nhờ phép biến đổi Laplace và chuỗi Taylor:

$$\begin{aligned} -\frac{Z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = & -\frac{Z\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=0}^{+\infty} \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{k=0}^{+\infty} \sum_{h=0}^{+\infty} \frac{(-1)^{j+i+h+k}}{2^{(j+i+h+k)} j! i! h! k!} \\ & \times \int_0^{+\infty} dt \frac{t^{j+i+h+k-\frac{1}{2}}}{(1+t)^{j+i+h+k}} \hat{A}^{+j} \hat{A}_3^{+h} e^{-\frac{1}{2}\hat{N}\ln(1+t)} e^{-\frac{1}{2}\hat{N}_3\ln(1+t)} \hat{A}^i \hat{A}_3^k \end{aligned}$$

Trong phương pháp toán tử, hamiltonian (11) được tách thành hai thành phần:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (12)$$

trong đó: toán tử $\hat{H}_0$ là toán tử trung hòa có chứa các thành phần trung hòa: toán tử $\hat{N}$ và hai toán tử $\hat{A}$, $\hat{A}^+$ có số mũ bằng nhau. Khi $\hat{H}_0$ tác dụng lên một trạng thái sẽ không làm thay đổi trạng thái đó, ma trận của toán tử $\hat{H}_0$ là một ma trận chéo; toán tử $\hat{V}$ là toán tử không trung hòa có chứa các thành phần không trung hòa: hai toán tử $\hat{A}$, $\hat{A}^+$ có số mũ khác nhau, khi tác dụng lên một trạng thái sẽ làm thay đổi trạng thái đang xét và ma trận của toán tử $\hat{V}$ có các thành phần nằm trên đường chéo chính bằng không. Cụ thể toán tử $\hat{H}_0$ có dạng:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & \frac{\omega}{4} \hat{N} + \frac{\omega}{4} \hat{N}_3 + \frac{\gamma}{2} \hat{l}_3 + \frac{\gamma^2}{16\omega} \hat{N} - \frac{Z\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{h=0}^{+\infty} \frac{2^{-2j-2h}}{j!j!h!h!} \\ & \times \int_0^{+\infty} dt \frac{t^{j+i+h+k-\frac{1}{2}}}{(1+t)^{j+i+h+k}} \hat{A}^{+j} \hat{A}_3^{+h} e^{-\frac{1}{2}\hat{N}\ln(1+t)} e^{-\frac{1}{2}\hat{N}_3\ln(1+t)} \hat{A}^i \hat{A}_3^k \end{aligned} \quad (13)$$

và toán tử $\hat{V}$ có dạng:

$$\begin{aligned} \hat{V} = & -\frac{\omega}{4} (\hat{A}^+ + \hat{A}) - \frac{\omega}{4} (\hat{A}_3^+ + \hat{A}_3) + \frac{\gamma^2}{16\omega} (\hat{A}^+ + \hat{A}) - \frac{Z\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{i \neq j} \sum_{h=0}^{+\infty} \sum_{k \neq h} \frac{1}{j!i!h!k!} \\ & \times \left(\frac{-1}{2} \right)^{j+i+h+k} \int_0^{+\infty} dt \frac{t^{j+i+h+k-\frac{1}{2}}}{(1+t)^{j+i+h+k}} \hat{A}^{+j} \hat{A}_3^{+h} e^{-\frac{1}{2}\hat{N}\ln(1+t)} e^{-\frac{1}{2}\hat{N}_3\ln(1+t)} \hat{A}^i \hat{A}_3^k \end{aligned} \quad (14)$$

Hàm sóng $|\varphi_n\rangle$ được biểu diễn qua bộ hàm đủ, trực giao, chuẩn hóa (8):

$$|\varphi_{n_1, n_2, \pm m}\rangle = |n_1, n_2, \pm m\rangle + \sum_{k_1=0, k_1 \neq n_1}^{+\infty} \sum_{k_2=0, k_2 \neq n_2}^{+\infty} C_{k_1, k_1} |k_1, k_2, \pm m\rangle. \quad (15)$$

Để giải phương trình Schrödinger (8) chúng tôi dùng sơ đồ vòng lặp, trong đó hàm sóng gần đúng ứng với vòng lặp (s) sẽ là:

$$|\varphi_{n_1, n_2, \pm m}\rangle^{(s)} = |n_1, n_2, \pm m\rangle + \sum_{k_1=0, k_1 \neq n_1}^{n_1+s} \sum_{k_2=0, k_2 \neq n_2}^{n_2+s} C_{k_1, k_1}^{(s)} |k_1, k_2, \pm m\rangle \quad (16)$$

ứng với năng lượng gần đúng bậc (s): $E_{n_1, n_2, \pm m}^{(s)}$. Dem thế vào phương trình Schrodinger và đồng nhất các trạng thái ta thu được:

$$\begin{aligned} E_{n_1, n_2, \pm m}^{(s)} = & H_{n_1, n_2} + \sum_{k_1=0, k_1 \neq n_1}^{n_1+s} \sum_{k_2=0, k_2 \neq n_2}^{n_2+s} C_{k_1, k_1}^{(s)} V_{n_1, n_2; k_1, k_2}, \\ C_{i_1, i_2}^{(s)} = & \frac{V_{n_1, n_2; i_1, i_2} + \sum_{k_1=0, k_1 \neq n_1}^{+\infty} \sum_{k_2=0, k_2 \neq n_2}^{+\infty} C_{k_1, k_1}^{(s)} V_{k_1, k_2; i_1, i_2}}{E_{n_1, n_2, \pm m} - H_{i_1, i_2}}. \end{aligned} \quad (17)$$

Trong công thức sơ đồ vòng lặp (17) chúng tôi sử dụng kí hiệu các yếu tố ma trận:

$$H_{j_1, j_2} = \langle j_1, j_2, \pm m | \hat{H}^0 | j_1, j_2, \pm m \rangle, \quad V_{k_1, k_2; i_1, i_2} = \langle k_1, k_2, \pm m | \hat{V} | i_1, i_2, \pm m \rangle.$$

Để thuận tiện cho việc so sánh kết quả với kết quả tính toán của các tác giả khác, chúng tôi tính năng lượng liên kết theo công thức:

$$I_n = \gamma - 2E_n. \quad (18)$$

4. Kết quả

Sử dụng sơ đồ vòng lặp và lập trình tính toán trên ngôn ngữ Fortran 90 thu được năng lượng E_n và năng lượng liên kết I_n của nguyên tử hydro trong từ trường ngoài có cường độ bất kì đối với mức năng lượng cơ bản và các mức kích thích đầu tiên, trình bày trong các bảng 1, bảng 2, và bảng 3. Trong các bảng có đưa ra kết quả của các tác giả khác để so sánh.

Bảng 1. Kết quả tính toán cho trạng thái $1s_0 (|\varphi_{0,0,0}\rangle)$ của nguyên tử hydro trong từ trường ngoài

γ	E_{000}	I_{000}	Tài liệu [8]	Tài liệu [5]	Tài liệu [6]
0	-0.49999	1.00000	-	-	-
0.01	-0.49953	1.00996	-	-	1.009950
0.02	-0.49942	1.01884	1.0198	-	1.019800
0.04	-0.49913	1.03826	1.0392	-	1.039201
0.1	-0.49705	1.09410	1.0951	1.09505296	1.095053
0.2	-0.48995	1.17990	1.1808	-	1.180763
0.4	-0.46423	1.32846	1.3293	-	1.329211
1	-0.33091	1.66182	1.6624	1.662332	1.662338
2	-0.02203	2.04406	2.0445	-	2.044428
4	0.71936	2.56128	2.5616	-	2.561596
10	3.25231	3.49538	3.4956	3.4948	3.495594
20	7.78469	4.43062	4.4308	-	4.430797

Bảng 2. Kết quả tính toán cho trạng thái $2p_{-1} (|\varphi_{0,0,-1}\rangle)$ của nguyên tử hydro trong từ trường ngoài

γ	E_{00-1}	I_{00-1}	Tài liệu [8]	Tài liệu [7]
0	-0.124999	0.249998	-	-
0.01	-0.129692	0.269384	-	-
0.02	-0.133800	0.287600	0.2876	-
0.04	-0.140447	0.320894	0.3209	-
0.1	-0.150884	0.401768	0.4017	0.4017
0.2	-0.150521	0.501042	0.5010	-
0.4	-0.121443	0.642886	0.6427	-
1	0.043548	0.912904	0.9132	0.9132

2	0.400402	1.199196	1.1992	-
4	1.211878	1.576244	1.5756	-
10	3.876025	2.247950	2.2507	2.2508
20	8.535024	2.292995	2.9303	-

Bảng 3. Kết quả tính toán cho mức năng lượng kích thích thứ nhất của nguyên tử hydro trong từ trường ngoài

γ	E_{001}	E_{010}	E_{100}	E_{00-1}
0	-0.124999	-0.124999	-0.124999	-0.124999
0.01	-0.119692	-0.124701	-0.124679	-0.129692
0.02	-0.113800	-0.123833	-0.123748	-0.133800
0.04	-0.100447	-0.120573	-0.120248	-0.140447
0.1	-0.050884	-0.101552	-0.099828	-0.150884
0.2	0.049479	-0.052584	-0.047259	-0.150521
0.4	0.278557	0.072918	0.087472	-0.121443
1	1.043548	0.525028	0.572829	0.043548
2	2.386491	1.344621	1.452690	0.400402
4	5.211878	3.119443	3.358025	1.211878
10	13.87603	8.626688	9.270247	3.876025
20	28.53502	18.01812	19.35229	8.535024

5. Kết luận

Đây là những kết quả bước đầu ứng dụng phương pháp toán tử cho bài toán nguyên tử hydro trong từ trường với cường độ bất kì. Những kết quả thu được cho thấy về nguyên tắc phương pháp toán tử cho ta kết quả với độ chính xác khá cao không phụ thuộc vào cường độ từ trường ngoài. Các bổ chính có tốc độ hội tụ cao. Chúng tôi sẽ tiếp tục tính toán làm chính xác hóa thêm các số liệu thu được và phát triển thêm ở các mức kích thích cao hơn. Kết quả sẽ trình bày trong công trình tiếp theo.

Ghi chú: Công trình này là một phần nghiên cứu theo đề tài khoa học và công nghệ cấp cơ sở mã số CS.2011.19.54 do tác giả Nguyễn Văn Hoa làm chủ nhiệm đề tài.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Phương Duy Anh (2010), “Phương pháp toán tử cho bài toán nguyên tử hydro trong từ trường có cường độ bất kì”, *Luận văn thạc sĩ*, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên TP HCM.
2. Lê Văn Hoàng (2003), “Phương pháp đại số cho tính toán hệ nguyên tử”, *Tạp chí Khoa học Trường ĐHSPTPHCM*, (2), tr. 115-125.
3. M. Bachmann, H. Kleinert, and A. Pelster (2000), “Variational approach to a hydrogen atom in a uniform magnetic field of arbitrary strength”, *Phys. Rev. A* **62** 052509.
4. I. D. Feranchuk, L. I. Komarov (1982), “The operator method of approximate solution of the Schrödinger equation”, *Phys. Lett. A* **88**, pp. 212-214.
5. J. C. López Vieyra and H. O. Pilon (2008), “Hydrogen atom in a magnetic field: electromagnetic transitions of the lowest states”, *Revista Mexicana De Fisica* **54**, pp. 49-57.
6. W. Rösner, G. Wunner, H. Herold and H. Ruder (1984), “Hydrogen atoms in arbitrary magnetic fields: I. Energy levels and wavefunctions”, *J. Phys. B.* **17**, pp. 29-52.
7. C. Stubbins, K. Das and Y. Shiferaw (2004), “Low-lying energy levels of the hydrogen atom in a strong magnetic field”, *J. Phys. B* **37**, pp. 2201-2209.
8. A. Thirumalai and Jeremy S. Heyl (2009), “Hydrogen and helium atoms in strong magnetic fields”, *Phys. Rev. A* **79** 012514.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 01-02-2012; ngày phản biện đánh giá: 05-3-2012;
ngày chấp nhận đăng: 24-4-2012)